



Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère.

Nicolas Lamarque

► To cite this version:

Nicolas Lamarque. Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère.. Sciences de l'ingénieur [physics]. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2007. Français. NNT: . tel-00410524

HAL Id: tel-00410524

<https://theses.hal.science/tel-00410524>

Submitted on 21 Aug 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Numéro d'ordre : 2560

THÈSE

présentée pour obtenir le titre de

**DOCTEUR DE
L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE
DE TOULOUSE**

Ecole doctorale : TYFEP

Spécialité : Dynamique des Fluides

Directeur de thèse : Thierry POINSOT

Par M. **Nicolas LAMARQUE**

Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère
--

Soutenue le 6 Décembre 2007 devant le jury composé de :

Boniface NKONGA	Maître de conférences à l'Université de Bordeaux I	Rapporteur
Julien REVEILLON	Professeur à l'Université de Rouen	Rapporteur
Sébastien DUCRUIX	Chargé de recherche au laboratoire EM2C	Membre
Gérard LAVERGNE	Professeur à l'ENSAE	Membre
Vincent MOUREAU	Ingénieur TURBOMECA	Membre
Franck NICLOUD	Professeur à l'Université de Montpellier II	Membre
Philippe VILLEDIEU	Professeur à l'INSA Toulouse	Membre
Thierry POINSOT	Directeur de Recherche à l'IMF de Toulouse	Directeur de Thèse

Réf. CERFACS : TH/CFD/07/117

Table des matières

Remerciements	7
Liste des symboles	11
Introduction	17
I LES en combustion diphasique	27
1 Modélisation mésoscopique des écoulements dispersés	31
1.1 Stratégies pour la simulation d'un spray dilué	31
1.2 Méthode Eulérienne par moyennage statistique	34
2 LES de la combustion diphasique	47
2.1 Equations de la combustion laminaire et monophasique	47
2.2 Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase porteuse	56
2.3 Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase dispersée	68
II Présentation et analyse numérique des schémas pour la LES de la combustion diphasique	73
3 Méthodes numériques pour la LES - Introduction	79
3.1 Schémas numériques pour la simulation aux grandes échelles	80
3.2 Travail de la partie II	88
3.3 Tableau récapitulatif des schémas étudiés pendant cette thèse	88

4	Méthodes numériques pour la LES - le code AVBP	91
4.1	Introduction	91
4.2	Nomenclature	95
4.3	Equations résolues et calcul des métriques	96
4.4	Les différents schémas de convection <i>cell-vertex</i>	100
4.5	Méthodes des résidus distribués et éléments finis	103
4.6	Schémas de la famille Taylor-Galerkin	114
4.7	Schémas de convection pour la partie diphasique	121
4.8	Termes de diffusion	122
4.9	Calcul des termes sources	125
4.10	Discretisation temporelle	127
4.11	Viscosité artificielle	131
4.12	Schémas de bords et conditions aux limites	136
5	Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - domaine périodique	145
5.1	Présentation du problème et notations	146
5.2	Analyse spectrale et équation résolue - étude monodimensionnelle	147
5.3	Cas multidimensionnels	169
5.4	Comparaisons des schémas d'AVBP- expériences numériques	172
5.5	Conclusions et discussions	186
6	Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - influence des conditions limites	191
6.1	Cavité acoustique 1D	192
6.2	Méthode de la matrice d'amplification	196
6.3	Application aux schémas d'AVBP	198
6.4	Résultats et comparaisons avec AVBP	205
6.5	Améliorations possibles de la précision globale des schémas	208
6.6	Conclusions	210
7	Application au foyer MERCATO (chambre de combustion académique)	213

7.1	Introduction - Contexte	213
7.2	Configurations	214
7.3	Géométrie A - écoulement monophasique	218
7.4	Géométrie B - écoulement diphasique réactif	242
 III Passage aux chambres d'hélicoptère : prise en compte de l'acoustique entrée-sortie		271
8	Calcul des impédances d'entrée et de sortie d'une chambre de combustion	275
8.1	Introduction	275
8.2	Article	276
 Conclusions et perspectives		309
 Bibliographie		313
 Annexes		331
A	Inversion de la matrice de masse	331
B	Optimisation des coefficients de schémas numériques d'ordre élevé pour la Simulation aux Grandes Echelles par algorithme génétique	333
B.1	Introduction	333
B.2	L'optimisation par algorithmes génétiques	334
B.3	Schémas Taylor-Galerkin pour une équation de convection linéaire mono-dimensionnelle et à coefficients constants	334
B.4	Résultats numériques	339
B.5	Conclusions et perspectives	344

TABLE DES MATIÈRES

Remerciements

Cette thèse a été effectuée au sein de l'équipe CFD du CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) et financée par une bourse CIFRE Turbomeca. Je tiens donc à remercier Jean-Claude ANDRE, directeur du CERFACS et Claude BERAT, chef du département combustion de Turbomeca, pour m'avoir permis d'effectuer cette thèse dans les meilleures conditions et offert l'opportunité de travailler un mois au CTR (Center for Turbulence Research) de l'Université de Stanford.

Je tiens à remercier sincèrement tous les membres du jury pour m'avoir fait le plaisir et l'honneur d'accepter de juger mon travail. Merci à Boniface NKONGA et Julien REVEILLON d'avoir accepté d'être rapporteurs et avoir soulevé des questions intéressantes. Je remercie également Sébastien DUCRUIX, Vincent MOUREAU, Franck NICOUD et Philippe VILLEDIEU pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. Enfin, je remercie Gérard LAVERGNE pour avoir tenu le rôle de président du jury et avoir lancé ma soutenance dans les meilleures conditions.

J'adresse ensuite toute ma reconnaissance aux personnes qui m'ont encadré pendant ma thèse : Bénédicte CUENOT, Laurent GICQUEL et Franck NICOUD toujours disponibles pour répondre aux questions et donner de nouvelles idées, tout ça dans une ambiance détendue et bien agréable. Un grand merci évidemment à mon directeur de thèse, Thierry POINSOT, jamais à court de remarques et d'énergie, sachant toujours comment remotiver et remettre le thésard en détresse dans le droit chemin. Merci aussi de m'avoir confié le Petit Livre noir de Vichnevetsky et Bowles [254] pendant trois ans ! Une pensée particulière à Nicolas SAVARY, ingénieur Turbomeca, avec qui je n'aurais pas travaillé pendant ces trois ans, mais qui a toute ma gratitude pour m'avoir grandement facilité la vie lorsqu'il fallait poser des jours de congé ou obtenir n'importe quel renseignement à Bordes. Enfin merci aussi à Dominique BISSIERES et Vincent MOUREAU qui ont très bien joué leur fonction d'encadrants Turbomeca.

Comme cela a été mentionné pendant la soutenance, j'ai passé le mois d'Avril 2006 à Stanford. L'ambiance était très studieuse mais aussi très chaleureuse. J'ai été fort bien accueilli par Vincent MOUREAU (encore lui, décidément !), alors post-doctorant au CTR et j'ai énormément appris à ses côtés. J'en profite pour remercier aussi Benoît FIORINA, Guillaume BLANQUART, Olivier DESJARDINS et tous les autres thésards du CTR que j'ai côtoyés et grâce à qui ce séjour s'est si bien passé.

Evidemment ces trois années de thèses (presque quatre si je compte la période stage de DEA) ne seraient pas aussi bien passées sans les post-doctorants, thésards et stagiaires avec qui j'ai travaillé, discuté ou simplement rigolé. Merci donc à Lolo et Karine (les anciens du bureau !), Alex, Val, Seb, Marta, Matthieu, Papy BENOIT, Aloïs, Antoine, Guilhem, Benoît, Jorge, Michaela, Guillaume, Felix, Jean-Mathieu, Mélodie, Olivier et bien sûr Tom (l'homme du "supercritique", apôtre du Picon-Bière).

Honte à moi si j'ai oublié quelqu'un.

Un grand merci également à Marie LABADENS, notre secrétaire, aux membres de l'administration du CERFACS et à l'équipe CSG. Si tout fonctionne aussi bien, c'est grâce à eux car ils nous facilitent grandement la vie et contribuent à la bonne ambiance du labo.

Ces trois années m'auront aussi permis de tester ma fibre mélomane. Grâce à Stephane PASCAUD (au micro et parfois au clavier !), Ludovic THOBOIS (aux baguettes aussi épaisses que des troncs) et Mauro PORTA (guitariste aux doigts de fée), j'ai passé des samedis après-midi bruyants et pu démontrer qu'à la fin, c'est quand même la basse qui gagne ! Je reste sur Mauro (façon de parler) pour le remercier aussi pour les moments passés ensemble à tenter de percer les mystères de NSCBC et des termes de bord (le fameux $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n)$). Merci aussi au barbu Simon Mendez. Pour les discussions, les bilans et les coups de pied au c.. au moment de l'écriture du papier "Nozzle". Merci docteur ! ;-)

Toute ma gratitude va aussi à Gabriel "Pablo" STAFFELBACH et Olivier "Papy" VERMOREL. L'énorme boulot qu'ils ont fourni pour les versions 6.X d'AVBP, en particulier, et leur très grande disponibilité (même lorsqu'ils sont débordés) méritent un vrai coup de chapeau.

Je tiens à remercier aussi la *MERCATO Team* : Nicolás GARCÍA ROSA tout d'abord, mon 'siamois' de thèse de l'ONERA, qui a débuté sa thèse CIFRE Turbomeca en même temps que moi. Ce fut un plaisir de travailler avec toi ! Ensuite, évidemment, merci aux *Mercato Rangers*, Eléonore RIBER, as "Force Rouge" (merci pour toutes nos longues discussions, scientifiques ou non !), et Marlène SANJOSE, as "Force Bleue" (du coup, j'ai fini en Force Jaune... mais je n'ai pas choisi !)¹.

Je vais finir les remerciements Cerfaciens en parlant de mes collègues de bureau(x). D'abord les collègues de mon deuxième bureau (le 'pas-officiel'²) : Mathieu LEYKO, Anthony ROUX et Florent DUCHAINE. Le premier pour sa curiosité sans bornes (fais gaffe à ne pas tout faire péter chez toi quand même !) et ses bonnes idées pour les impédances. Le deuxième, membre de l'Orléans Connection, avec qui j'ai pris un très grand plaisir à travailler (et d'ailleurs on doit continuer !) et qui partage un humour assez proche du mien (parfois très subtil... et souvent pas du tout !!!) : un regard parfois suffit à nous lancer vers des voies encore inexplorées. Parfois ça m'effraie ;-). Enfin le dernier des trois, lui aussi lié à Orléans par sa moitié (qui se trouve être une très grande amie et mon ancienne - intraitable - binôme !), impressionnant d'efficacité au boulot et lui aussi capable de sortir les pires horreurs au nom de l'Humour (si si Flo, la vérité doit être faite !).

Terminons avec mes collègues de bureau (le vrai, cette fois³) : Guillaume BOUDIER (the 'Amazing Dindon'), Jacques LAVEDRINE (so british !) et Claude SENSIAU (Macho macho man). Grâce à ces trois individus, j'aurais passé trois années géniales. Je ne peux pas dénombrer toutes les discussions tantôt scientifiques, tantôt complètement délirantes que nous avons eues ensemble ou que j'ai eues avec chacun d'entre vous. Toujours est-il que j'en garderai beaucoup de très bons souvenirs : les 'mercredis gras', les craquages de certains soirs (en particulier pendant la phase de rédaction), les réflexions pince-sans-rire de Jacques, les fous rires au téléphone de Guillaume, les coups de gueule de Claude et ses blagues (parfois) mysogines (eh si...)... etc. MERCI !

¹Cette phrase démontre une fois encore qu'abuser du mouvement mésoscopique décorrélé (RUM) atteint gravement les neurones.

²aka 'La Presque-Ile de la Tentation'

³aka 'Le Carré des Poètes'

Pour finir, je tiens à remercier tous mes copains et copines pour les bons moments en dehors du travail. Un clin d'oeil à Mat, Guillaume, Anaïs et Mel pour être venus le jour de la soutenance. Ca m'a fait plaisir et m'a bien aidé ! Merci enfin à toute ma famille et en particulier mon Papa, ma Maman et ma moitié, Lara, pour leur patience et leur soutien pendant ces trois années. C'est à eux que je dédie ce travail.

REMERCIEMENTS

Liste des symboles

Abréviations - Partie I

DNS	Simulation Numérique Directe
DQMOM	Direct Quadrature Method Of Moments
LES	Simulation aux grandes échelles
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RUM	Random Uncorrelated Model

Lettres romaines - Partie I

$\check{c}_p$	Pseudo-vitesse du son dans la phase dispersée
$\delta\check{R}_{p,ij}$	Tenseur des vitesses décorrélées
$\delta\check{S}_{p,ijk}$	Tenseur du troisième moment des vitesses décorrélées
δu_j	j -ième composante de la vitesse décorrélée des particules
$\vec{c}_p$	Vecteur vitesse d'une particule dans l'espace des phases
$\vec{F}$	Force
$\vec{u}_p$	Vecteur vitesse des particules
$\vec{x}_p$	Température des particules
$\vec{x}_p$	Vecteur positions des particules
B_M	Nombre de Spalding
C_d	Coefficient de traînée
C_S	Constante de Smagorinsky
C_p	Capacité calorifique massique à pression constante
C_v	Capacité calorifique massique à volume constant
D	Coefficient de diffusion
D	Longueur caractéristique (souvent un diamètre)

d	Diamètre
E	Energie totale massique volumique
e_s	Energie sensible massique volumique
f_p	Fonction densité de probabilité normalisée par le nombre de particules
G	Filtre LES
G	Nombre de combustion de groupe
h_s	Enthalpie sensible massique volumique
$J_{j,k}$	j -ième composante du flux diffusif de l'espèce k
m	Masse
N	Nombre d'espèces
N_p	Nombre de gouttes dans un nuage de gouttes
n_p	Nombre de gouttes par unité de volume
p	Pression
Pr	Nombre de Prandtl
q_j	j -ième composante du flux de chaleur
R	Constante des gaz parfaits
r	Constante des gaz d'un mélange
Re	Nombre de Reynolds
S	Paramètre de séparation
S_L^0	Vitesse de flamme laminaire
S_T	Vitesse de flamme turbulente
S_{ij}	Tenseur des taux de déformations
Sc	Nombre de Schmidt
Sh	Nombre de Sherwood
St	Nombre de Stokes

T	Température	ν_t	Viscosité cinématique turbulente
t	Temps	ν_{RUM}	Viscosité liée au mouvement décorrélé
u	Vitesse	$\overline{\tau_{ij}}$	Tenseur des contraintes visqueuses de sous-maille
u_j	j -ième composante de la vitesse	ϕ	Phase
V	Vitesse d'une particule discrète	ψ_p	Champ quelconque dans l'espace des phases
V	Vitesse de diffusion	ρ	Masse volumique
V	Volume	σ	Tension de surface
v	Vitesse	τ	Temps caractéristique
V_r	Vitesse relative entre les deux phases	τ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses
W	Masse molaire	Ξ	Plissement
We	Nombre de Weber	ζ_p	Température d'une particule dans l'espace des phases
X	Fraction molaire	l_t	Echelle intégrale
X	Position d'une particule discrète		
Y	Fraction massique		
Lettres grecques - Partie I		Lettres spéciales - Partie I	
α	Fraction volumique de la phase dispersée	$\mathbb{C}$	Termes de collision
χ	Fonction indicatrice	$\mathcal{E}$	Fonction d'efficacité
$\delta\check{\theta}_p$	Energie du mouvement décorrélé	$\mathcal{F}$	Epaississement
Δ	Taille caractéristique du filtre LES	$\mathcal{H}$	Réalisation d'une phase
δ	Distance	$\mathcal{N}_p$	Nombre de réalisations du champ de particules
δ_L^0	Epaisseur de flamme laminaire	$\mathcal{Q}_j$	Taux d'avancement de la j -ième réaction
δ_{ij}	Tenseur de Kronecker	Opérateurs / Notations - Partie I	
$\dot{\omega}_k$	Taux de réaction de l'espèce k	$\langle \cdot \rangle_p$	Moyenne de phase pondérée par la masse des particules
$\dot{\omega}_T$	Taux de dégagement de chaleur	$\{ \cdot \}_p$	Moyenne de phase
η_K	Echelle de Kolmogorov	$\bar{\cdot}$	Grandeur filtrée
Γ	Taux de transfert de masse	$\dot{\cdot}$	Valeur moyenne mésoscopique (autre notation pour $\langle \cdot \rangle_p$)
γ	Coefficient polytropique	$\hat{\cdot}$	Grandeur filtrée au sens de Favre pour la phase dispersée
κ_{RUM}	Viscosité liée au mouvement décorrélé	$\tilde{\cdot}$	Grandeur filtrée au sens de Favre
λ	Conduction thermique	Indices - Partie I	
μ	Viscosité dynamique	∞	Loin de la goutte considérée
μ_p	Masse d'une particule dans l'espace des phases		
ν	Viscosité cinématique		

Σ	A la surface d'une goutte	PSI	Positive Streamwise Invariant
CC	Valeur de Clausius-Clapeyron	PVC	Precessing Vortex Core
$coll$	Relatif aux collisions	QUICK	Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics
F	Carburant	RK	Runge-Kutta
f	Relatif au fluide	SGE	voir LES
$f - p$	Relatifs aux transferts entre les gouttes et le gaz	SUPG	Streamline Upwind Petrov-Galerkin
O	Comburant	TTG	Two step Taylor Galerkin
p	Relatif aux particules	TVD	Total Variation Diminishing
t	Relatif aux termes de sous-maille	VMM	Variational Multiscale Method
Exposants - Partie I		Lettres romaines - Partie II	
*	Pour un tenseur, désigne la partie déviatrice	$[Q]$ ou $[Q]$	Matrice d'amplification
C	Relatif aux termes convectifs	$\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{H}$	Flux des variables conservatives (vecteurs)
t	Relatif aux termes de sous-maille	$\mathbf{U}$	Vecteur des variables conservatives
V	Relatif aux termes visqueux	$\delta \mathbf{U}$	Mise à jour temporelle de la variable $\mathbf{U}$
Abréviations - Partie II		Δt	Pas de temps (s)
(W)ENO	(Weighted) Essentially Non Oscillatory	$\dot{m}$	Débit
ABC	Additional Boundary Correction	$\mathbf{BT}_j$	Terme de bord de la partie diffusive issue des méthodes Taylor-Galerkin au noeud $j \in \partial\Omega$ (vecteur)
BQUICK	Bounded QUICK	$\mathbf{D}$	Terme de diffusion artificielle (vecteur)
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy (voir ν)	$\mathbf{LL}_j$	Terme diffusif pour les méthodes Taylor-Galerkin au noeud j (vecteur)
CV	Cell-Vertex	$\mathbf{L}_j$	Terme convectif pour les méthodes Taylor-Galerkin au noeud j (vecteur)
DC	Différences centrées	$\mathbf{N}$	Résidu distribué aux noeuds (vecteur)
EF	Elements Finis	$\mathbf{R}$	Résidu à la cellule (vecteur)
ETG	Euler Taylor Galerkin	$\mathbf{S}$	Vecteur contenant les termes sources
FCT	Flux Corrected Transport	$\mathbf{W}$	Vecteur des grandeurs caractéristiques
LDA	Low Diffusion A	$\mathbf{Z}$	Variables de Roe (vecteur)
LW	Lax-Wendroff	$\underline{\mathbf{A}}, \underline{\mathbf{B}}, \underline{\mathbf{C}}$	Matrices Jacobiennes des flux
MILES	Monotonically Integrated LES	$\underline{\mathbf{D}}_{j,e}$	Matrice de distribution du résidu de la cellule K_e au noeud j
MUSCL	Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws	$\underline{\mathbf{E}}_{\mathbf{U}}$	Matrice $\vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{n}$
N	Narrow		
NSCBC	Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions		
PPM	Piecewise Parabolic Method		

$\mathbf{Id}$	Matrice identité	s	Rapport stoechiométrique
$\mathbf{L}_U$	Matrice des vecteurs propres (lignes) à gauche de $\mathbf{E}_U$	t	Temps
$\mathbf{R}_U$	Matrice des vecteurs propres (colonnes) à droite de $\mathbf{E}_U$	u	Champ scalaire
$\vec{n}$	Vecteur unitaire, désignant souvent une normale sortant d'un domaine	U_k	Valeur de l'approximation u_h de la solution au noeud k
$\vec{S}$	Normale pondérée	u_τ	Vitesse de frottement
$\vec{c}$	Vecteur vitesse de convection	V	Mesure (surface ou volume) d'une cellule ou d'un volume de contrôle associé à noeud
$\vec{x}$	Vecteur position	w_j	Fonction poids au noeud j
A	Opérateur de semi-discrétisation spatiale	x, y, z	Coordonnées dans l'espace
c_φ	Vitesse de phase	Z	Scalaire passif
D	Coefficient de diffusion	z	Fraction de mélange
d	Nombre de dimensions du domaine Ω	Lettres grecques - Partie II	
ET	Erreur de troncature	χ_j	Fonction caractéristique au noeud j
F	Nombre de Fourier	Δ	Longueur de référence
f	Fréquence	ϵ	Erreur
G	Coefficient d'amplification	ϵ	Paramètre utilisateur pour les viscosités artificielles
H	Méthode d'avancement en temps	κ	Hyperviscosité (viscosité d'ordre 4)
h	Pas d'espace ou taille caractéristique d'une cellule	λ	Longueur d'onde
K	polygone ou polyèdre	λ	Valeur propre
k	Nombre d'onde	ν	Nombre de Courant-Friedrichs-Lewy ou CFL
k_l	Paramètre d'entrée de l'écoulement au sommet l	Ω	Relation de dispersion
k_{res}	Energie cinétique turbulente résolue	Ω	Volume de contrôle / Domaine de calcul
k_{sgs}	Energie cinétique turbulente de sous-maille	ω	Pulsation (temporelle)
m	Entier positif, nombre de variables conservatives	ϕ	Richesse
N_h	Entier positif, nombre de noeuds dans le maillage	Φ_e	Fluctuation à la cellule (scalaire)
N_K	Nombre de cellules	ϕ_G	Phase du coefficient d'amplification
n_v	Entier positif, nombre de sommets	ϕ_j	Fonction de forme
Q	Critère Q	ρ	Rayon spectral
S	Nombre de swirl	τ_w	Frottement pariétal
		$\underline{\mathbf{A}}$	Matrice diagonale contenant les valeurs propres de $\mathcal{A} \cdot \vec{n}$
		ξ	Nombre d'onde adimensionné

ζ Détecteur de forts gradients

Lettres spéciales- Partie II

$\vec{\mathcal{F}}$ Tenseur des flux des variables conservatives

$\Im$ Partie imaginaire

$\mathcal{C}_j$ Volume de contrôle associé au noeud j

$\mathcal{D}_j$ Ensemble de cellules liées au noeud j

$\mathcal{K}$ Matrice de convection

$\mathcal{L}$ Matrice de raideur

$\mathcal{M}$ Matrice de masse

$\mathcal{T}_h$ Maillage

$\mathcal{L}$ Vecteurs des ondes caractéristiques (cf. NSCBC)

$\Re$ Partie réelle

$\vec{\mathcal{A}}$ Tenseur des Jacobiennes des flux

V_g Vitesse de groupe

Opérateurs / Notations - Partie II

$[\cdot]$ Matrices carrées de taille $m N_h \times m N_h$

$\langle \cdot \rangle$ Moyenne temporelle

$\{\cdot\}_{inj}$ Moyenne surfacique sur la surface d'injection

$\{\cdot\}$ Vecteurs de taille $m N_h$

$\bar{\cdot}$ Valeur moyennée en temps

$\cdot'$ Valeur acoustique

$\hat{\cdot}$ Coefficient ou transformée de Fourier

Indices - Partie II

b Aux bords du domaine de calcul

c Au centre du domaine de calcul

e Entier positif, relatif aux éléments ou cellules

f Entier positif, relatif à une arête / face

h Relatif à la discrétisation

I Partie imaginaire

j Entier positif, relatif aux noeuds

k Entier positif, relatif aux sommets des cellules (parfois aussi utilisé comme indice muet pour la méthode de Galerkin)

l Entier positif, relatif aux sommets des cellules

R Partie réelle

Exposants - Partie II

(c) Valeur corrigée par les conditions limites

(CL) Partie modifiée par la condition limite

(p) Valeur prédite par le schéma numérique

(u) Partie non modifiée par la condition limite

$*$ Relatif au schéma numérique

C Partie convective

$D_{j,e}$ Coefficient de distribution du résidu de la cellule K_e au noeud j

ff Relatif à une face appartenant à la frontière $\partial\Omega$

i $\sqrt{-1}$

n Entier positif, relatif aux itérations temporelles

n Entier positif, relatif à la discrétisation temporelle

V Partie visqueuse

Introduction

Contexte d'étude

Défis et besoins de la combustion dans l'industrie

A l'heure actuelle, les combustibles fossiles représentent la principale source d'énergie dans le monde, aussi bien pour la production d'électricité que pour le transport. La combustion des énergies fossiles (gaz et pétrole) présente deux inconvénients majeurs :

- ▷ Les combustibles fossiles ne sont pas inépuisables. Les prévisions concernant les réserves restantes de pétrole, gaz naturel et charbon sont souvent alarmantes (quelques dizaines d'années pour le pétrole, par exemple).
- ▷ L'impact sur l'environnement est considérable. L'augmentation de l'effet de serre et *a fortiori* une partie du réchauffement climatique dû à l'activité humaine, en particulier depuis la Révolution Industrielle, ne sont désormais plus contestés.

Malgré les alternatives possibles, notamment en ce qui concerne la production d'électricité (énergie nucléaire, hydraulique, solaire, éolienne...), la combustion reste prépondérante. Dans le domaine du transport aérien, elle s'avère encore indispensable puisque sans concurrent. A l'heure actuelle, il n'est donc pas question de stopper la combustion des énergies fossiles. L'objectif actuel est donc de réduire au maximum la consommation ainsi que l'émission des polluants.

Pour des raisons de sécurité, les flammes des foyers aéronautiques sont principalement de diffusion, c'est-à-dire que carburant et comburant ne sont pas mélangés avant d'entrer dans la chambre de combustion. Ces flammes sont plus stables et plus sûres que les flammes de prémélange car elles ne se propagent pas [176]. Cependant, les champs de température obtenus dans la chambre de combustion sont plus hétérogènes et les températures maximales sont souvent plus élevées. Or, des polluants, comme les oxydes d'azote NO_x , nocifs pour la couche d'ozone, se forment principalement dans les zones très chaudes de la chambre (voie thermique). Une solution est donc de diminuer les températures maximales mais au risque de faire apparaître d'autres polluants comme le monoxyde de carbone CO . Il existe donc une fourchette de températures maximales atteintes dans la chambre, comme le montre la figure 1, qui assure une réduction conséquente de ces deux polluants. Pour atteindre cette fenêtre, les industriels s'orientent de plus en plus vers une combustion prémélangée avec des richesses basses, afin de réduire à la fois la pollution et la consommation. Toutefois, ce régime de combustion a le défaut majeur d'être propice aux instabilités de combustion [176]. Celles-ci sont non seulement dangereuses pour le système au sein duquel elles apparaissent (ce qui peut conduire à l'endommagement voire à la destruction) mais peuvent en outre émettre plus de polluants [212].

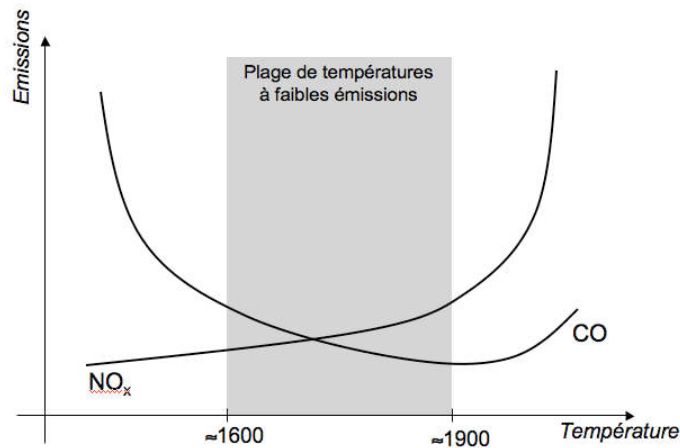


FIG. 1 - Emissions de monoxyde de carbone et d'oxydes d'azote en fonction de la température dans la zone primaire de la chambre de combustion. La fenêtre grisée correspond à l'objectif des motoristes.

La connaissance, la compréhension et la maîtrise des instabilités de combustion sont donc des enjeux considérables pour les industriels dans le but d'obtenir une combustion à la fois plus efficace et moins polluante. Les instabilités de combustion peuvent s'exprimer de différentes manières, à travers un couplage entre plusieurs phénomènes (fluctuations acoustiques, d'entropie ou de vorticit ), la flamme  tant toujours au centre de la boucle. On peut prendre l'exemple de la figure 2 pour d crire de fa on simplifi e un sc nario possible. Une fluctuation (acoustique, entropique ou encore de vorticit ) passant   travers la flamme peut exciter celle-ci. En r ponse, la flamme peut engendrer une onde acoustique et une onde entropique se propageant vers l'aval. Celles-ci peuvent g n rer, en atteignant les bords du domaine (murs ou sortie), des ondes acoustiques, susceptibles de remonter l' coulement et d'exciter   nouveau la flamme, voire remonter plus en amont et perturber l'injection de carburant. Le tout, comme on le constate, forme une boucle qui peut, le cas  ch ant,  tre instable. Il est difficile de pouvoir pr dire si un syst me va  tre instable. Ainsi, mettre en place des crit res de stabilit  demeure un vrai d fi [86]. Dans ce contexte, la simulation num rique a un r le important   jouer et, tout particuli rement, la simulation aux grandes  chelles (SGE ou LES pour *Large-Eddy Simulation*). Cette m thode de calcul sera pr sent e dans la suite de cette partie. Contrairement aux strat gies RANS (pour *Reynolds Averaged Navier-Stokes*) qui sont souvent associ es   des  tats stationnaires, la LES permet de reproduire des  coulements turbulents fortement instationnaires, une des cl s essentielles pour observer et  tudier les instabilit s.

Les r sultats, notamment obtenus   l'EM2C par Rey [191] et au CERFACS par Selle [216, 217], Martin [137, 138] et Giauque [87, 86], sont autant d'exemples d montrant la capacit  de la LES   simuler et   pr dire des instabilit s de combustion dans des g om tries de plus en plus complexes, ce qui motive chercheurs et industriels. Il reste toutefois encore de nombreux points   travailler comme on va le pr senter plus loin. Un des points concerne notamment la prise en compte de la phase dispers e. Jusqu'  pr sent, bon nombre de LES, y compris les travaux qu'on vient de citer, consid raient une combustion au sein d'un  coulement monophasique. Dans certains cas, il s'agit effectivement du mode de fonctionnement de la chambre, les turbines   gaz destin es   la production d' lectricit  en sont un exemple. Dans les foyers a ronautiques ou dans les moteurs   piston, cela n'est pas toujours le cas.

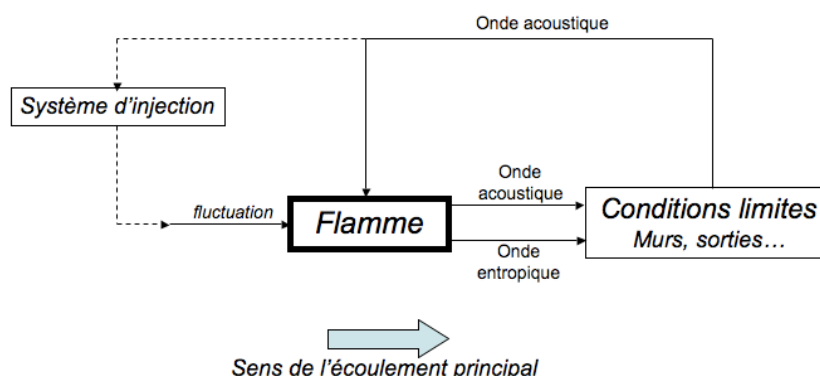


FIG. 2 - Un exemple de diagramme présentant des boucles pouvant générer des instabilités de combustion. La flamme a un rôle central.

Sprays et combustion

Sprays

Dans bien des applications industrielles, le carburant peut être une phase liquide dans la chambre de combustion. En effet, le stockage et le transport sont bien plus simples et sûrs que pour un gaz. Dans un foyer aéronautique, le carburant est souvent injecté directement dans la chambre de combustion via un ou plusieurs atomiseurs. Ceux-ci permettent de générer un spray dilué⁴ de gouttes, augmentant ainsi considérablement la surface totale de la phase liquide, ce qui favorise les échanges avec le gaz environnant. Les étapes intermédiaires entre un jet liquide (état continu) et un brouillard composé de gouttelettes supposées sphériques (état dispersé) sont appelées atomisations et sont représentées sur la figure 3. Le nombre caractéristique le plus souvent associé à cette désintégration est le nombre de Weber :

$$We = \frac{\rho V_r^2 D}{\sigma} \quad (1)$$

où ρ est la masse volumique du gaz, V_r la vitesse relative entre les deux fluides, D une taille caractéristique et σ la tension de surface du liquide. Le nombre de Weber compare les forces aérodynamiques aux tensions de surface et est utilisé afin de fixer un seuil au-delà duquel il y a atomisation (pour une goutte ou un jet).

Les deux étapes les plus importantes avant d'obtenir un spray dilué sont les suivantes [121] :

- ▷ La première étape est l'atomisation primaire. La rupture de la nappe ou du jet de liquide sortant de l'injecteur est principalement due à la grande différence de vitesse entre les deux phases, générant un cisaillement important. Celui-ci crée des instabilités au sein du liquide qui s'amplifient et déforment le jet. La tension de surface provoque alors la rupture en ligaments (minimisation de l'énergie de surface). La phase liquide n'est plus continue.
- ▷ L'atomisation secondaire regroupe un très grand nombre de phénomènes. Tout d'abord, les ligaments se déforment en interagissant avec le gaz et se rompent en de plus petites structures. Des gouttes instables, car n'ayant pas une forme sphérique, apparaissent et se désintègrent, à leur tour, de différentes manières selon leur nombre de Weber. Tant que le spray est suffisamment dense, les

⁴On reviendra brièvement sur la notion de dilution plus tard.

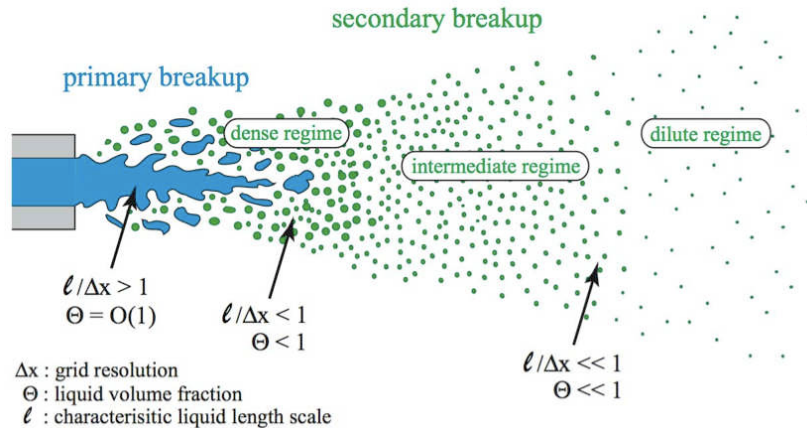


FIG. 3 - Schéma présentant les différentes étapes de l'atomisation, du jet liquide sortant de l'atomiseur au brouillard de gouttes. Cette image est tirée d'une présentation de M.Herrmann au Summer Program 2006 du CTR de Stanford.

collisions sont nombreuses et complexes. Elles peuvent provoquer la coalescence entre les gouttes ou bien la rupture.

Le brouillard dilué obtenu est polydisperse (le diamètre des gouttes est variable en son sein), composé de gouttelettes dont les tailles et les vitesses varient sensiblement selon le type d'atomiseur, le débit de liquide et l'environnement dans lequel celui-ci débouche. L'atomisation est un phénomène chaotique, il est difficile de prévoir *a priori* quelles seront les caractéristiques du spray.

Il existe un grand nombre d'atomiseurs s'appuyant sur différentes technologies pour générer un spray. On en cite deux assez répandues dans les foyers aéronautiques [121] :

- ▷ Les atomiseurs pressurisés : le seul moteur est la différence de pression entre le réservoir et la chambre. Le liquide est déstabilisé par les interactions avec les parois de l'injecteur et débouche dans le foyer par un orifice généralement circulaire et de très petite taille. Ce sont les systèmes les plus simples à fabriquer. Certains appliquent un mouvement de swirl au jet (comme les atomiseurs simplex ou duplex) afin d'obtenir un spray avec un angle important. Les atomiseurs pressurisés ont l'avantage de produire des sprays assez homogènes en taille de gouttes. Cependant, il est nécessaire d'appliquer un grand différentiel de pression pour assurer un débit suffisant.
- ▷ Les atomiseurs pressurisés assistés : le liquide interagit avec de l'air avant d'être injecté dans la chambre afin de le déstabiliser plus tôt. Cette méthode permet de diminuer le différentiel de pression nécessaire à une bonne atomisation avec les injecteurs précédents et d'utiliser des carburants plus visqueux.

Quelques mots sur la combustion diphasique

La présence de brouillards de gouttes dans le foyer augmente donc considérablement les phénomènes à prendre en compte et l'impact sur la combustion est loin d'être négligeable [74]. Même dans le cas où la combustion est homogène (zones d'évaporation et de combustion séparées), le mélange turbulent du carburant et du comburant est fortement déterminé par le transport des gouttes. Celles-ci étant des objets ponctuels, le champ de vapeur de fuel est ainsi fortement hétérogène, ce qui est une source de fluctuation pour la flamme (qu'elle soit prémélangée ou pas). Lorsque zones d'évaporation et de réaction

se superposent, on peut alors assister à différents modes de combustion de spray [23, 74, 190] (voir figure 4). Ceux-ci sont classés en fonction de différents paramètres, notamment le nombre G , définissant la combustion de groupe et s'écrivant :

$$G \simeq \frac{5N_p^{2/3}}{S}$$

où N_p est le nombre de gouttes dans le brouillard et $S = \delta_s/\delta_{rf}$ le paramètre de séparation, avec δ_s la distance moyenne entre les gouttes et δ_{rf} un rayon caractéristique d'une flamme de diffusion entourant une goutte isolée évaporante. On notera que, dans le cas d'un spray dilué, on a l'approximation suivante : $\delta_s = n_p^{-1/3}$ où n_p est le nombre de gouttes par unité de volume.

Lorsque $G \gg 1$, alors on parle de combustion externe. Les gouttes étant trop proches, la diffusion de chaleur ne peut se faire correctement entre elles. Seules les gouttes situées le plus à l'extérieur s'évaporent et une flamme se forme alors autour du nuage. A l'inverse, pour $G \ll 1$, les gouttes sont très éloignées les unes des autres permettant à la chaleur de circuler entre elles et provoquant une évaporation et une combustion individuelle. Borghi [23] décrit en outre d'autres modes de combustion (par poches ou par percolation) en introduisant des temps caractéristiques chimiques et d'évaporation. A cela s'ajoute la flamme épaissie ou combustion distribuée, qui apparaît lorsque le temps d'évaporation est très long devant le temps chimique. Les gouttes ont alors le temps de pénétrer la zone de réaction et la flamme s'épaissit (la flamme est plus large que la distance entre gouttes).

Comme le soulignent Réveillon et Vervisch [190], les descriptions précédentes ne prennent pas en compte deux facteurs importants. Le premier est la richesse globale du spray (proportionnel au rapport entre masse de fuel liquide et masse d'oxydant), qui va avoir une importance considérable sur la distribution locale de carburant gazeux et donc sur le type de flamme rencontré dans le foyer. Par exemple, des zones très riches peuvent apparaître et être en dehors des limites de flammabilité. Le second paramètre est l'advection. La description précédente n'en tient pas compte, or là encore, il est clair que dans un brûleur réel, la vitesse du gaz et des gouttes va avoir une influence certaine sur la topologie de la flamme. Ils ont donc mené une étude complète à l'aide de DNS d'un spray dilué dont la richesse globale, le temps d'évaporation et la séparation entre les gouttes varient, pour des cas laminaires et faiblement turbulents. Ils mettent ainsi en évidence différentes structures de flammes, en plus de celles décrites par Borghi. Les trois principales sont les suivantes (voir la figure 5) :

- ▷ *Combustion externe* : elle correspond à un régime dans lequel il existe une flamme continue. Cette combustion externe peut être "fermée" (faible richesse, le spray est enfermé par la flamme, la combustion est principalement prémélangée) ou "ouverte" (richesse plus importante, la flamme se positionne au niveau de la ligne stoechiométrique).
- ▷ *Combustion de groupe* : les gouttes brûlent par paquets. La combustion peut être prémélangée riche ou bien de diffusion.
- ▷ *Combustion hybride* : il s'agit d'un mode situé entre les deux précédents. On assiste à de la combustion prémélangée par paquets. Cependant, comme la richesse globale est plus importante, les fronts de diffusion ne peuvent se stabiliser autour des gouttes. Le fuel restant brûle en formant une flamme de diffusion à l'extérieur du spray.

Dans une configuration complexe avec des zones de recirculation et un spray polydisperse, il est fort probable qu'on rencontre tous les types de flammes évoqués précédemment. Cependant, il faut bien noter que dans une LES de combustion diphasique dans un foyer aéronautique (cf. chapitre 7), il n'est pas possible de fournir une description aussi précise, l'échelle des phénomènes décrits précédemment étant trop petite. Ceux-ci sont donc principalement modélisés.

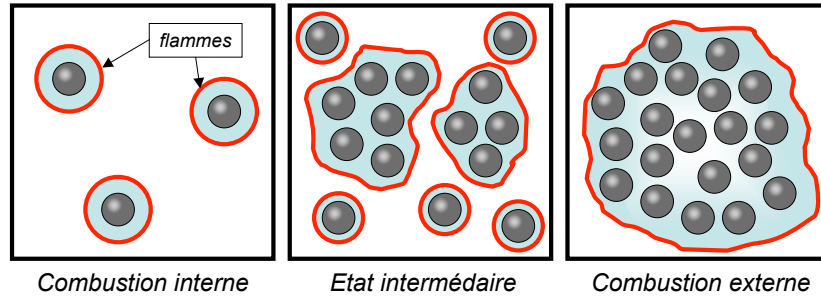


FIG. 4 - Trois différents régimes de combustion de spray au repos. De gauche à droite, on a $G \gg 1$, $G \simeq 1$ et $G \ll 1$. [74].

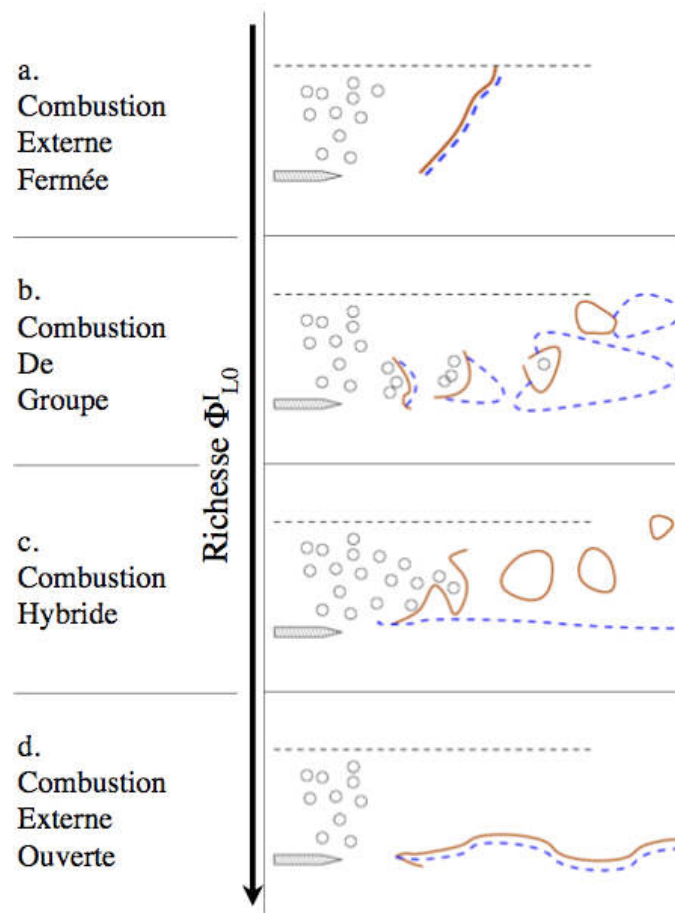


FIG. 5 - Différents types de combustion d'un spray observés par Réveillon et Vervisch [190].

Spécificités de la LES de la combustion diphasique dans une chambre de combustion réelle

L'étude de la combustion, mono- ou diphasique, dans une géométrie simplifiée ou même un domaine périodique, grâce à la Simulation Numérique Directe (ou DNS pour *Direct Numerical Simulation*) ou la LES, est très riche en enseignements et permet de mieux comprendre les mécanismes de base et les interactions entre les différents événements (évaporation, mélange turbulent, réaction chimique, acoustique...). Elle sert de référence et permet de créer des modèles. Les LES de la combustion dans

les chambres réelles font intervenir **tous** les phénomènes en même temps, ainsi que les interactions de ceux-ci avec leur environnement (parois, obstacles...). Pour obtenir des résultats acceptables tant qualitativement que quantitativement, il est nécessaire de prendre en compte le plus de mécanismes possibles avec suffisamment de finesse. Cependant, la précision requise ne doit ni augmenter considérablement le coût de calcul, ni nuire à la stabilité de calcul, déjà grandement diminuée à cause de la présence de bords. En se basant sur une chambre de combustion d'un moteur aéronautique, on va présenter quelques-unes des spécificités des LES d'écoulements diphasiques réactifs.

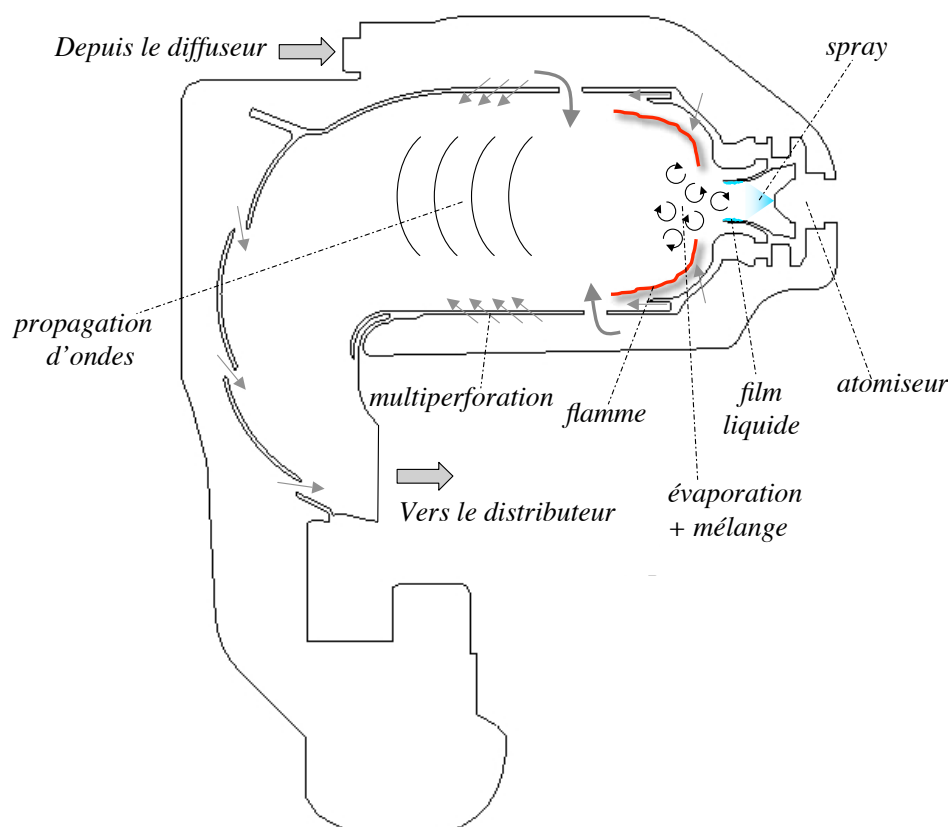


FIG. 6 - Coupe longitudinale d'un foyer aéronautique et mise en évidence de certains phénomènes s'y produisant.

La figure 6 est une coupe longitudinale d'un foyer aéronautique. Afin de reproduire au mieux la combustion dans cette chambre, il faut essayer de tenir compte, autant que faire se peut, de nombreux phénomènes en jeu et de restrictions :

- ▷ *Maillage* L'exemple choisi permet d'illustrer les difficultés liées à la discrétisation du domaine de calcul. Les systèmes d'injection peuvent être formés de plusieurs tourbillonneurs, composés eux-mêmes de plusieurs pales qui peuvent avoir des formes variées. Les parois des chambres sont souvent percées en plusieurs endroits (trous primaires, trous de dilution, films de refroidissement, multiperforations). Dans la majorité des cas, les écoulements sont résolus, ce qui implique la présence de mailles de tailles très différentes et des raffinements variables. L'emploi de grilles non structurées est alors préconisé.
- ▷ *Flamme turbulente* Bien que les cellules du maillage puissent atteindre des tailles très faibles, certaines échelles ne sont pas reproductibles dans la simulation comme les plus petits tourbillons ou la flamme dont l'épaisseur est très inférieure au millimètre. Il est donc nécessaire d'utiliser

des modèles afin de pouvoir résoudre la flamme et tenir compte de l'effet de la turbulence de sous-maille sur l'écoulement et sur la flamme.

- ▷ *Propagation d'ondes* Au sein d'un écoulement compressible et réactif, d'une manière générale, un grand nombre d'ondes se propagent [235]. Celles-ci sont de différentes natures (entropique, acoustique, vorticale...), d'échelles très diverses et se propagent à des vitesses qui varient sensiblement. Une *méthode de résolution précise* est donc nécessaire. Ainsi, le schéma numérique de convection doit avoir, dans la mesure du possible, deux qualités importantes afin de ne pas dégrader l'information : il ne doit pas amortir le signal transporté et la vitesse de propagation doit être correcte. Sur maillage non structuré et dans une géométrie complexe, il est très délicat d'obtenir les deux qualités à la fois, tout en assurant la stabilité nécessaire et un coût de calcul raisonnable.
- ▷ *Limites du domaine de calcul* Le domaine de calcul est **borné et fermé**. Cela se traduit par la présence de murs, d'entrées et de sorties. Par rapport à un domaine périodique, cela implique deux conséquences de taille. Tout d'abord, il convient d'imposer des **conditions limites** dans le calcul, permettant de mimer au mieux la physique. Si le choix de ces conditions limites est important (et n'est pas toujours trivial), le **traitement numérique** de celles-ci l'est d'autant plus. Ainsi, dans une LES d'un fluide compressible et réactif, la gestion de l'acoustique est primordiale et l'emploi de conditions limites avec **décomposition en ondes caractéristiques** est indispensable. La seconde conséquence de la présence des bords est la perte de précision des discrétisations spatiales. Celle-ci, pourtant locale, peut avoir des effets néfastes sur la qualité globale de la solution.
- ▷ *Phase liquide* La majorité des systèmes de combustion fonctionne avec des **carburants liquides**, par souci de sécurité et facilité de stockage. En plus de tous les phénomènes physiques qui se produisent en combustion monophasique (mélange turbulent, écoulement multi-espèces, réactions chimiques...), un **écoulement diphasique** implique des événements supplémentaires à prendre en compte. Simuler les atomisations primaire et secondaire des nappes liquides puis ligaments sortant de l'atomiseur reste difficile et contraignant. Les intégrer dans une simulation de combustion en géométries complexes n'est pas encore envisageable bien que des tentatives aillent dans ce sens. Pour simuler une injection liquide, il faudra donc avoir à faire des simplifications importantes. De la même manière, la génération de films liquides ou même l'impact de gouttes sur certaines parois peuvent avoir une grande conséquence sur les caractéristiques de vitesses et de tailles de gouttes du brouillard se propageant vers la flamme.
- ▷ *Interaction liquide-gaz* La **dispersion** du nuage de gouttes, les **échanges entre phases** (de quantité de mouvement, de chaleur, de masse), l'interaction avec la **turbulence** et l'**évaporation** font partie des phénomènes qu'une LES diphasique se doit de pouvoir simuler, car ils ont un impact certain sur la combustion. La résolution de la **phase dispersée** est particulièrement **délicate**. Le choix de la stratégie pour simuler la propagation d'un brouillard de gouttes est primordial. Les équations sont très instables une fois discrétisées. Il est donc nécessaire d'utiliser des **méthodes numériques adéquates** et dont les qualités peuvent être très différentes de celles évoquées précédemment.

Un autre outil pour l'étude des instabilités : les solveurs de Helmholtz

Les instabilités thermo-acoustiques sont particulièrement dangereuses et peuvent provoquer des dommages sévères dans les chambres de combustion. Il est donc primordial de pouvoir les contrôler. Comme

on l'a mentionné précédemment, la LES est un outil très précis mais encore coûteux. Une alternative pour étudier le couplage entre une flamme et l'acoustique consiste à utiliser les solveurs de Helmholtz multidimensionnels [160], permettant de résoudre l'équation des ondes sonores dans un milieu réactif et dans une géométrie complexe. Ceux-ci ne s'intéressent qu'aux champs acoustiques ce qui rend les calculs moins longs. Néanmoins, à l'instar de LES, la définition des conditions limites reste cruciale. Celles-ci s'expriment à travers les impédances acoustiques qu'il est nécessaire de déterminer avec précision.

Objectifs

Dans cette thèse, on va présenter deux outils numériques et certaines applications. Le premier code de calcul, AVBP, permet de réaliser des simulations aux grandes échelles d'un écoulement turbulent, diphasique et réactif. Le second, appelé NOZZLE, permet de déterminer les impédances acoustiques dans les tuyères et donc de déterminer les conditions limites acoustiques pouvant être utilisées dans un solveur de Helmholtz. Les objectifs de cette thèse sont les suivants :

- ▷ Une évaluation détaillée des méthodes numériques utilisées dans AVBP, en particulier des schémas de convection. Le but est de montrer à quel point ceux-ci sont adaptés aux LES mono- et diphasiques, et comment ils peuvent être améliorés, si nécessaire. Pour ce faire, une description complète de ces méthodes numériques doit être faite dans un premier temps, puis des calculs d'erreurs théoriques et pratiques. L'influence des bords du domaine de calcul est par ailleurs considérable. De ce fait, le choix du traitement des conditions limites ainsi que des discrétisations spatiales est à étudier.
- ▷ L'étude de la combustion diphasique dans une géométrie complexe à l'aide d'une description Eulerienne de la phase dispersée. On cherche à connaître les possibilités de cette méthodologie et à décrire le type de flamme que l'on peut rencontrer dans cette situation. En outre, les études de l'écoulement monophasique non réactif puis de l'écoulement diphasique réactif représentent des tests "grandeur nature" pour les méthodes numériques d'AVBP.
- ▷ La présentation de trois stratégies pour déterminer les impédances acoustiques de tubes à section variable tels que les diffuseurs et distributeurs haute pression installés en amont et en aval des foyers aéronautiques. Ces méthodes de calcul permettent de fournir des conditions limites acoustiques précises, particulièrement utiles pour les solveurs de Helmholtz.

Plan

Ce manuscrit est composé de trois parties distinctes :

- La **partie I** de cette thèse rappelle les équations permettant de décrire l'évolution d'un écoulement compressible, turbulent, diphasique et réactif, comme on peut en rencontrer dans une chambre de combustion aéronautique ou d'un moteur à piston. Dans le chapitre 1, on évoque brièvement certaines méthodes numériques pour simuler un brouillard de gouttes puis on présente le formalisme Eulérien choisi et utilisé dans cette thèse.

Le chapitre 2 rappelle ensuite les équations de Navier-Stokes pour un fluide compressible multi-espèces et réactif. On dépeint rapidement les principes de la simulation aux grandes échelles puis le filtrage des équations du gaz et du liquide. On détaille en outre les différents modèles utilisés, en particulier celui de *flamme épaissie* pour la combustion.

- La **partie II** commence par une description rapide des schémas de convection utilisés souvent pour la simulation aux grandes échelles sur maillages structurés et non-structurés (chapitre 3). On introduit ensuite dans le chapitre 4 les méthodes de discrétisation utilisées dans AVBP. On décrit en particulier la formulation *cell-vertex* et on rappelle ses liens avec les éléments finis et les schémas Taylor-Galerkin implantés dans le code spécialement pour réaliser des LES [47]. Les chapitres 5 et 6 apportent une analyse numérique détaillée des schémas de convection exposés dans le chapitre 4, sans et avec les bords du domaine. Cette analyse se compose de calculs d'erreurs théoriques et pratiques. Enfin, le chapitre 7 fournit les résultats obtenus en utilisant AVBP pour simuler un écoulement monophasique puis un écoulement diphasique réactif dans une géométrie complexe dont les caractéristiques sont proches de celles des chambres de combustion des moteurs d'hélicoptères. Ce chapitre permet à la fois de présenter certains phénomènes se produisant dans ce type de foyer et d'évaluer les méthodes numériques employées pour résoudre le problème étudié.
- La **partie III** est une description de trois méthodes pour calculer les impédances acoustiques de tubes à section variable. Ceci est en effet très utile pour caractériser les conditions limites nécessaires pour calculer les modes propres acoustiques d'un foyer aéronautique.

Première partie

LES en combustion diphasique

Table des matières

1	Modélisation mésoscopique des écoulements dispersés	31
1.1	Stratégies pour la simulation d'un spray dilué	31
1.1.1	Introduction - particule isolée	31
1.1.2	Méthodes Lagrangiennes	32
1.1.3	Méthodes Eulériennes	33
1.2	Méthode Eulérienne par moyennage statistique	34
1.2.1	Principes de la méthode	34
1.2.2	Equation de transport de la fdp	35
1.2.3	Moyennes dans l'espace des phases	35
1.2.4	Equation de Enskog généralisée	36
1.2.5	Notions de grandeurs mésoscopiques et de mouvement décorrélé (RUM)	37
1.2.6	Equations de conservation	38
1.2.7	Termes d'échange entre les phases et modèles	40
1.2.8	Simplifications pour la suite et discussion	43
2	LES de la combustion diphasique	47
2.1	Equations de la combustion laminaire et monophasique	47
2.1.1	Equations de conservation	47
2.1.2	Equation d'état	49
2.1.3	Conservation de la masse : flux diffusif des espèces	50
2.1.4	Tenseur des contraintes visqueuses	51
2.1.5	Vecteur flux de chaleur	51
2.1.6	Coefficient de transport	52
2.1.7	Cinétique chimique	53
2.2	Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase porteuse	56
2.2.1	Le principe de la LES	56
2.2.2	Equations filtrées pour les écoulements non réactifs	57
2.2.3	Modèles pour le tenseur des contraintes de sous-maille $\overline{\tau_{ij}}^t$:	60
2.2.4	Le modèle de flamme épaissie	62
2.3	Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase dispersée	68

TABLE DES MATIÈRES

2.3.1	Filtrage des équations de la phase dispersée	68
2.3.2	Modèle pour le tenseur des contraintes de sous-maille $\overline{\tau_{p,ij}}^t$	69
2.3.3	Termes sources pour la phase gazeuse	70
2.3.4	Combustion et modification du terme d'évaporation	71

Chapitre 1

Modélisation mésoscopique des écoulements dispersés

Introduction

1.1 Stratégies pour la simulation d'un spray dilué

1.1.1 Introduction - particule isolée

Dans cette thèse, on s'intéresse à la dispersion d'un brouillard de gouttes ou de particules (*spray*)¹ dans une chambre de combustion. Dans cette partie, on n'évoque pas les phénomènes d'atomisations primaire et secondaire qui ont permis l'obtention du spray. De plus, par hypothèse, on considère que le spray est dilué, c'est-à-dire que la fraction volumique de gouttes est inférieure à environ 0,1%. Ceci permet de dire que le transfert de quantité de mouvement entre les deux phases est essentiellement à sens unique : du gaz (phase porteuse) vers les particules (phase dispersée). En outre, la dilution permet de s'affranchir de l'interaction complexe que sont les collisions entre les gouttes. Une seconde approximation consiste à considérer que les particules sont toutes sphériques et de densité ρ_p constante. En suivant ces hypothèses et en considérant un faible Reynolds particulaire, Maxey et Riley [140] ont réalisé un bilan des forces sur une particule isolée qui s'écrit :

$$m_p \frac{d\vec{v}_p}{dt} = \vec{F}_{p,1} + \vec{F}_{p,2} \quad (1.1)$$

où m_p est la masse de la particule, $\vec{v}_p$ sa vitesse, $\vec{F}_{p,1}$ les forces que le gaz exercerait sur un élément de fluide situé à la place de la particule et $\vec{F}_{p,2}$ les forces qui résultent de la perturbation du champ de vitesse du gaz par la particule.

Février [69], Kaufmann [109] et Riber [192] détaillent l'ensemble de ces forces (traînée, poussée d'Archimède, force de masse ajoutée, d'histoire, portance...) avant de réaliser des simplifications, compte tenu des écoulements qui nous intéressent en particulier. De toutes les forces qu'ils énumèrent, seule la

¹Dans cette thèse, les mots particules et gouttes représentent le même objet physique.

traînée est conservée par la suite ². Celle-ci s'exprime comme suit :

$$\vec{F}_p = \frac{3}{4} \rho \frac{\pi d_p^3}{6} \frac{1}{d_p} C_d ||\vec{u}_{f@p} - \vec{v}_p|| (\vec{u}_{f@p} - \vec{v}_p) \quad (1.2)$$

et d_p est le diamètre de la particule considérée, C_d le coefficient de traînée et $\vec{u}_{f@p}$ la vitesse du fluide porteur à la position de la particule. On reviendra sur le calcul de la traînée un peu plus loin. On s'intéresse tout d'abord aux stratégies qu'on peut employer pour simuler la propagation d'un brouillard de gouttes ou de particules.

1.1.2 Méthodes Lagrangiennes

La première méthode qu'on considère ici est parfois appelée DPS (pour *Discrete Particle Simulation*). Elle est utilisée et rencontrée dans de nombreuses simulations gaz-particules (ou gouttes) allant des configurations académiques [231, 66, 227, 251, 147] à des géométries beaucoup plus complexes [208, 92, 13] et les domaines d'application sont très nombreux comme le soulignent Crowe et al [53]. Elle consiste à suivre chaque goutte d'un point de vue Lagrangien, en résolvant pour chacune la position $\vec{X}_p^{(k)}$ et $\vec{V}_p^{(k)}$ de la manière suivante :

$$\frac{dX_{p,i}^{(k)}}{dt} = V_{p,i}^{(k)} \quad (1.3)$$

$$\frac{dV_{p,i}^{(k)}}{dt} = F_{p,i}^{(k)} \quad (1.4)$$

A ces équations peuvent s'ajouter la variation de masse et de température, permettant ainsi de prendre en compte le phénomène d'évaporation, notamment. L'avantage majeur de cette méthode provient du fait qu'il n'est pas nécessaire d'ajouter une modélisation supplémentaire afin de tenir compte de la polydispersion ou du croisement de trajectoires. Dans le cadre d'écoulements turbulents, elle a été utilisée avec succès, couplée à des méthodes RANS, LES et DNS pour le gaz. Afin de réaliser le couplage entre les deux phases, il faut localiser les particules sur le maillage utilisé pour résoudre les équations du gaz. Pour ce faire, des algorithmes d'interpolation précis doivent être utilisés (afin d'éviter des phénomènes de diffusion numérique, notamment).

Le point dur de cette stratégie reste les calculs sur machines parallèles [208]. Suivre une particule passant d'un domaine attribué à un processeur à un autre contrôlé par un processeur différent reste difficile [81]. En outre, la décomposition du domaine de calcul ne suit pas les mêmes règles que pour la phase porteuse Eulérienne. Dans ce dernier cas, le temps de calcul sur une cellule ou sur un groupe de cellules donné ne dépend pas de la solution. Par contre, dans l'approche Lagrangienne, le nombre d'opérations va être fortement modifié en fonction du nombre de particules dans le domaine d'un processeur. Ainsi la charge de calcul peut être répartie inégalement entre les processeurs et dégrader l'efficacité globale. L'étape de décomposition du domaine de calcul et de répartition des tâches entre processeurs doit donc être répétée plusieurs fois pendant le calcul [92].

On note qu'il existe des méthodes Lagrangiennes dites *stochastiques*, permettant de limiter le nombre de

²On se place dans le cas où les particules sont plus petites que l'échelle de Kolmogorov et de masse volumique bien importante que le fluide porteur.

gouttes dans le calcul. L'idée est de représenter plusieurs particules ayant des propriétés similaires par une seule particule numérique. Le gain en temps de calcul est non négligeable. En revanche, un niveau de modélisation supplémentaire est alors nécessaire.

Enfin on termine ce paragraphe en évoquant les méthodes semi-lagrangiennes. Le but de cette stratégie est de construire des champs Eulériens pour décrire la phase dispersée. L'avancement en temps de t à $t + \Delta t$ est cependant réalisé selon un formalisme Lagrangien : on construit les trajectoires des particules arrivant à un noeud donné à $t + \Delta t$ afin de connaître leurs propriétés et en déduire, de ce fait, le champ Eulérien. L'avantage que présentent ces schémas est leur stabilité inconditionnelle et leur lien évident avec des méthodes de caractéristiques (cf le schéma de Courant-Isaacson-Rees). Leur précision dépend des méthodes d'interpolation utilisées pour calculer les propriétés associées aux particules au temps t [167].

1.1.3 Méthodes Eulériennes

L'autre grande catégorie de stratégie est associée au formalisme Eulérien. Il existe plusieurs formulations différentes mais l'idée de base est de représenter les propriétés de la phase dispersée par des champs Eulériens. On ne s'intéresse donc plus aux particules individuellement. Le nuage de gouttes est vu comme une phase continue. Parmi les diverses méthodes existantes, on en présente deux.

Filtrage volumique

Cette première formulation est aussi appelée méthode à deux fluides. On trouve une présentation et une discussion très détaillée dans la thèse de Kaufmann [109]. On part du principe que les équations de Navier-Stokes sont valables pour les deux phases (porteuse et dispersée). L'obtention des équations se fait en plusieurs étapes :

1. On multiplie toutes les équations (pour les deux phases) par une fonction indicatrice χ_ϕ . Celle-ci est égale à 1 dans une phase notée ϕ et nulle dans l'autre.
2. Application des relations de commutation entre dérivées et fonction indicatrice lorsque c'est possible.
3. L'opérateur de moyenne $\langle \cdot \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \cdot \chi_\phi dV$ est appliqué sur un volume de contrôle Ω .
4. On modélise les termes non résolus.

On obtient par exemple pour la conservation de la masse et de la quantité de mouvement de la phase ϕ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_\phi \alpha_\phi + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_\phi \alpha_\phi U_{\phi,j} = S_{\alpha,\phi} \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_\phi \alpha_\phi U_{\phi,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_\phi \alpha_\phi U_{\phi,j} U_{\phi,i} = S_{u_i,\phi} \quad (1.6)$$

et $\alpha_\phi = \langle \chi_\phi \rangle_\Omega$ est la fraction volumique de la phase ϕ , ρ_ϕ la masse volumique et $U_{\phi,i}$ la vitesse moyenne ou filtrée au sens de Favre ($\alpha_\phi \rho_\phi U_{\phi,i} = \langle \rho_\phi u_\phi \chi_\phi \rangle_\Omega$). $S_{\alpha,\phi}$ et $S_{u_i,\phi}$ sont des termes à modéliser comprenant les effets de pression, de viscosité, d'échanges entre phases et des fluctuations d'échelles inférieures à Ω .

Filtrage statistique

La description du spray, du point de vue statistique, repose sur les mêmes idées que la théorie cinétique des gaz. Il s'agit de la stratégie sur laquelle repose la description de la phase dispersée dans AVBP et on la présente en détail dans la section suivante.

1.2 Méthode Eulérienne par moyennage statistique

1.2.1 Principes de la méthode

La méthode de description Eulérienne du spray utilisée dans cette thèse est basée sur les travaux de Février et Simonin [70, 71, 225]. Celle-ci repose sur une approche statistique. Les équations de conservation utilisées pour la phase dispersée sont obtenues à partir de l'intégration dans l'espace des phases d'une fonction de densité de probabilité (fdp) f_p normalisée par le nombre de particules présentes. Comme l'explique Février [70], cette fdp est construite à partir d'une notion de moyenne d'ensemble. On considère la fonction $W_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p \vec{x}, t)$ telle que :

$$W_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p \vec{x}, t) = \delta(\vec{x} - \vec{x}_p(t)) \delta(\vec{c}_p - \vec{v}_p(t)) \delta(\zeta_p - T_p(t)) \delta(\mu_p - m_p(t)) \quad (1.7)$$

où δ est la distribution de Dirac, c'est-à-dire :

$$\delta(\phi - \phi_p(t)) = 1 \quad \text{si} \quad \phi = \phi_p(t) \quad (1.8)$$

$$\delta(\phi - \phi_p(t)) = 0 \quad \text{sinon} \quad (1.9)$$

On se place dans le cas où la turbulence de la phase porteuse n'est pas modifiée par les particules (écoulements dilués). Pour une réalisation donnée du champ porteur notée $\mathcal{H}_f$, on peut avoir $\mathcal{N}_p$ réalisations différentes du champ de particules. En utilisant la fonction $W_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p \vec{x}, t)$, on peut alors définir une fonction de densité de probabilité f_p conditionnée par la réalisation $\mathcal{H}_f$ dont la définition est :

$$f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) = \langle W_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \vec{x}, t) | \mathcal{H}_f \rangle \quad (1.10)$$

où l'opérateur $\langle \cdot | \mathcal{H}_f \rangle$ est la moyenne arithmétique sur l'ensemble des N_p particules et sur un grand nombre $\mathcal{N}_p$ de réalisations du champ des particules $\mathcal{H}_p$, ce qui s'écrit :

$$f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) = \lim_{\mathcal{N}_p \rightarrow +\infty} \left[\frac{1}{\mathcal{N}_p} \sum_{\mathcal{N}_p} \sum_{m=1}^{N_p} W_p^{(m)}(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p(\vec{x}, t) | \mathcal{H}_f) \right] \quad (1.11)$$

où $f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f)$ est la fdp "sachant" la réalisation $\mathcal{H}_f$, et $f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p d\vec{x}$ représente le nombre de particules, à l'instant t ayant une position $\vec{x}_p$, une vitesse $\vec{v}_p$, une température T_p et une masse m_p telles que : $\vec{x} \leq \vec{x}_p \leq \vec{x} + d\vec{x}$, $\vec{c}_p \leq \vec{v}_p \leq \vec{c}_p + d\vec{c}_p$, $\zeta_p \leq T_p \leq \zeta_p + d\zeta_p$ et $\mu_p \leq m_p \leq \mu_p + d\mu_p$.

1.2.2 Equation de transport de la fdp

L'évolution spatio-temporelle de la densité de probabilité conditionnée décrite dans la section précédente suit une équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} c_{p,j} f_p = - \frac{\partial}{\partial c_{p,j}} \left[\frac{du_{p,j}}{dt} f_p \right] - \frac{\partial}{\partial \zeta_p} \left[\frac{dT_p}{dt} f_p \right] - \frac{\partial}{\partial \mu_p} \left[\frac{dm_p}{dt} f_p \right] + \left(\frac{\partial f_p}{\partial t} \right)_{coll} \quad (1.12)$$

Le terme $\frac{\partial}{\partial t}$ correspond à la dérivée le long du chemin suivi par la particule p . Il correspond à la variation de la propriété considérée, causée par les effets des forces extérieures qui s'exercent sur la particule p et des échanges avec la phase porteuse. Les trois premiers termes du membre de droite de l'équation (1.12) correspondent à la variation de f_p dues aux forces extérieures et aux échanges. Le dernier terme modélise les interactions entre les particules (frottements, collisions, fractionnement, atomisation,...).

1.2.3 Moyennes dans l'espace des phases

L'équation de transport pour un moment de la fdp f_p s'obtient en multipliant (1.12) par la grandeur $\psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p)$ puis en intégrant l'équation obtenue dans l'espace des phases. La moyenne de phase de la fonction $\psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p)$ est définie par :

$$\{\psi\}_p = \frac{1}{\check{n}_p} \int \psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.13)$$

et $\check{n}_p$ est le nombre de particules par unité de volume. Celui s'obtient en moyennant la fdp sur l'ensemble des réalisations possibles, soit :

$$\check{n}_p = \int f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.14)$$

La moyenne de phase de $\psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p)$ représente la moyenne de ψ sur l'ensemble des réalisations possibles de la phase dispersée (connaissant la réalisation de la phase gazeuse). Comme le poids m_p des particules (les particules peuvent être des gouttes s'évaporant par exemple) peut varier, on introduit une deuxième moyenne par analogie avec la moyenne de Favre :

$$\check{\psi} = \langle \psi \rangle_p = \frac{1}{\rho_p \check{\alpha}_p} \int \mu_p \psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.15)$$

avec ρ_p la masse volumique des particules et $\check{\alpha}_p$ la fraction volumique de liquide. Celle-ci est définie par :

$$\rho_p \check{\alpha}_p = \check{n}_p \{m_p\}_p = \int \mu_p f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.16)$$

Comme le rappelle Riber [192], le produit $\psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f)$ doit toujours être fini et tendre vers zéro aux limites du domaine d'intégration.

1.2.4 Equation de Enskog généralisée

Après multiplication de (1.12) par $\psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p)$ puis intégration dans l'espace des phases, on obtient l'équation d'Enskog généralisée qui décrit l'évolution de la grandeur mésoscopique $\check{\psi}$ et s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p \langle \psi \rangle_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \langle u_{p,j} \psi \rangle_p &= \mathbb{C}(m_p \psi) \\ &+ \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{du_{p,j}}{dt} \frac{\partial \psi}{\partial u_{p,j}} \right\rangle_p + \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dT_p}{dt} \frac{\partial \psi}{\partial T_p} \right\rangle_p \\ &+ \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dm_p}{dt} \left(\frac{\partial \psi}{\partial m_p} + \frac{\psi}{m_p} \right) \right\rangle_p \end{aligned} \quad (1.17)$$

Le terme collisionnel $\mathbb{C}(m_p \psi)$ correspond à la variation de $\rho_p \check{\alpha}_p \check{\psi}$ dues aux variations de $m_p \psi$ lors de collisions.

En appliquant le principe fondamental de la dynamique aux particules, on obtient :

$$\left\langle \frac{du_{p,j}}{dt} \right\rangle_p = \left\langle \frac{F_{p,j}}{m_p} \right\rangle_p \quad (1.18)$$

$\vec{F}_p$ sont les forces extérieures qui agissent sur les particules. Dans les cas qu'on considère, comme on l'a dit précédemment, on ne tient compte que de la traînée, soit :

$$F_{p,j} = \frac{1}{\tau_p} (u_{p,j} - u_j) \quad (1.19)$$

où u_j est la vitesse du fluide (qu'on avait noté $\vec{u}_{f@p}$ dans l'expression (1.2)) et τ_p un temps de relaxation³.

L'équation d'Enskog (1.17) devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p \langle \psi \rangle_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \langle u_{p,j} \psi \rangle_p &= \mathbb{C}(m_p \psi) - \frac{\check{n}_p}{\check{\tau}_p} \left\{ (u_{p,j} - u_j) \frac{\partial \psi}{\partial u_{p,j}} \right\}_p \\ &+ \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dT_p}{dt} \frac{\partial \psi}{\partial T_p} \right\rangle_p \\ &+ \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dm_p}{dt} \left(\frac{\partial \psi}{\partial m_p} + \frac{\psi}{m_p} \right) \right\rangle_p \end{aligned} \quad (1.20)$$

Enfin, si la fonction ψ dépend aussi de l'espace et du temps, alors on ajoute dans le membre de droite de (1.17) et (1.20) :

$$\rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\rangle_p + \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \right\rangle_p \quad (1.21)$$

³Celui-ci sera défini à partir des vitesses corrélées dans la suite. On ajoutera de ce fait le symbole $\check{\tau}$ quand on y fera référence.

1.2.5 Notions de grandeurs mésoscopiques et de mouvement décorrélé (RUM)

Les quantités mésoscopiques, définies comme dans l'équation (1.16), correspondent à la moyenne sur l'ensemble des réalisations possibles de la phase dispersée, connaissant la réalisation de la phase porteuse. Elles permettent de décrire la dynamique d'ensemble des particules. Afin de décrire les fluctuations de la dynamique par rapport au mouvement d'ensemble, on introduit aussi les grandeurs relatives au mouvement décorrélé (en anglais RUM, *Random Uncorrelated Motion*, rien à voir avec la boisson). La figure (1.1) présente les deux concepts. On définit ainsi :

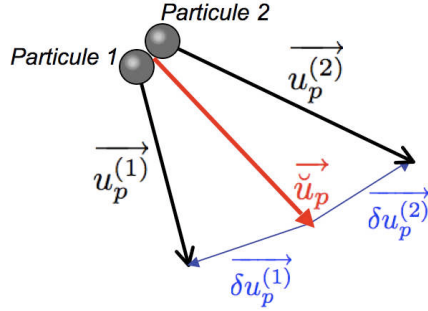


FIG. 1.1 - Schéma présentant le mouvement de deux particules et mettant ainsi le mouvement corrélé mésoscopique (moyen ou d'ensemble) et le mouvement décorrélé (écart par rapport au mouvement d'ensemble).

- la vitesse corrélée ou mésoscopique dont les composantes sont notées $\check{u}_{p,j}$

$$\check{u}_{p,j}(\vec{x}, t | \mathcal{H}_f) = \langle u_{p,j} \rangle_p = \frac{1}{\rho_p \check{\alpha}_p} \int \mu_p c_{p,j} f_p d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.22)$$

- la vitesse décorrélée $\delta \check{u}_{p,j}$ (en anglais *Random Uncorrelated Velocity*)

Pour chaque particule notée (k), on peut décomposer la vitesse Lagrangienne en deux contributions :

$$u_{p,j}^{(k)}(t) = \check{u}_{p,j}(\vec{x}_p^{(k)}(t), t | \mathcal{H}_f) + \delta u_{p,j}^{(k)}(t) \quad (1.23)$$

On note que seule la vitesse mésoscopique est définie comme une grandeur Eulérienne, puisque c'est une vitesse qui concerne l'ensemble des particules. A l'inverse, les vitesses Lagrangiennes et décorrélées sont relatives à la particule (k). Par définition, on a :

$$\langle \delta u_{p,j} \rangle_p = 0$$

- Pour décrire les fluctuations de vitesse, on utilise donc le tenseur des vitesses décorrélées défini par :

$$\delta \check{R}_{p,ij}(\vec{x}, t | \mathcal{H}_f) = \langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \rangle_p = \frac{1}{\rho_p \check{\alpha}_p} \int \mu_p [c_{p,i} - \check{u}_{p,i}] [c_{p,j} - \check{u}_{p,j}] f_p d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.24)$$

Moreau [146] et Riber [192] décrivent les équations de transport pour les 6 composantes du tenseur (il est symétrique), ainsi que le transport de $\delta \check{S}_{p,ijk}$, qui correspond au troisième moment des vitesses des particules et qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \delta \check{S}_{p,ijk}(\vec{x}, t | \mathcal{H}_f) &= \langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \delta u_{p,k} \rangle_p \\ &= \frac{1}{\rho_p \check{\alpha}_p} \int \mu_p [c_{p,i} - \check{u}_{p,i}] [c_{p,j} - \check{u}_{p,j}] [c_{p,k} - \check{u}_{p,k}] f_p d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \end{aligned} \quad (1.25)$$

Pour des raisons de contraintes, au niveau du temps de calcul, les équations liées au tenseur des vitesses décorrélées ne sont pas résolues dans AVBP. Pour donner une description des vitesses décorrélées, on utilise la grandeur suivante :

- Energie du mouvement décorrélé (en anglais *RUE : Random Uncorrelated Energy*) notée $\delta\check{\theta}_p$. Il s'agit d'une grandeur introduite par Simonin et al [226]. Elle correspond à la moitié de la trace du tenseur $\delta\check{R}_{p,ij}$, soit :

$$\delta\check{\theta}_p = \frac{1}{2}\delta\check{R}_{p,kk} = \frac{1}{2}\langle\delta u_{p,k}\delta u_{p,k}\rangle \quad (1.26)$$

- On va étudier des écoulements diphasiques dans lesquels les gouttes sont susceptibles de s'évaporer. Pour décrire la température au sein de celles-ci, on introduit l'enthalpie sensible mésoscopique notée $\check{h}_{s,p} = C_{p,p}\check{T}_p$ et égale à :

$$\check{h}_{s,p}(\vec{x}, t | \mathcal{H}_f) = \langle C_{p,p}T_p \rangle_p = \frac{1}{\rho_p\check{\alpha}_p} \int \mu_p C_{p,p} \zeta_p f_p d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.27)$$

- L'enthalpie sensible décorrélée est donc la suivante : $\delta h_{s,p} = C_{p,p}\delta T_p$ et on peut écrire :

$$\delta h_{s,p} = h_{s,p} - \check{h}_{s,p} \quad \text{et} \quad \langle \delta h_{s,p} \rangle_p = 0$$

1.2.6 Equations de conservation

On écrit maintenant les équations de conservation à partir de l'équation d'Enskog (1.20) en remplaçant ψ par la quantité désirée.

- *Conservation du nombre de particules :*
On pose ici $\psi = \frac{1}{\mu_p}$ et on obtient :

$$\frac{\partial \check{n}_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \check{n}_p \check{u}_{p,j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \check{n}_p \{\delta u_{p,j}\}_p + \mathbb{C}(1) \quad (1.28)$$

Dans cette thèse, on n'a étudié que les écoulements monodisperses. Concrètement, cela signifie que dans un volume de contrôle (qu'on définira plus tard) dans lequel sont discrétisées les équations, les gouttes ont un diamètre unique. Ainsi la moyenne statistique $\{m_p\}_p$ est une constante et le terme $\check{n}_p \{\delta u_{p,j}\}_p$ s'annule.

- *Conservation de la fraction volumique :*
On pose $\psi = 1$ et on a :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \check{u}_{p,j} = \check{n}_p \left\{ \frac{dm_p}{dt} \right\}_p + \mathbb{C}(m_p) \quad (1.29)$$

Il convient en outre de noter que dans un calcul monodisperse, on a :

$$\check{\alpha}_p = \check{n}_p \frac{\pi \check{d}^3}{6} \quad (1.30)$$

où $\check{d}$ est le diamètre des particules.

- *Conservation de la quantité de mouvement :*

On pose $\psi = \check{u}_{p,i}$ et on a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p \check{u}_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \check{u}_{p,i} \check{u}_{p,j} &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{R}_{p,ij}^* - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{\theta}_p \\ &\quad - \frac{\rho_p \check{\alpha}_p}{\check{\tau}_p} (\check{u}_{p,i} - u_i) \\ &\quad + \check{n}_p \left\{ \frac{dm_p}{dt} \check{u}_{p,i} \right\}_p + \mathbb{C}(m_p \check{u}_{p,i}) \end{aligned} \quad (1.31)$$

Le terme $-\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{\theta}_p$ est parfois assimilé dans les cas monodisperses à un terme de pression en écrivant [109] :

$$\check{p}_{RUM} = \frac{2}{3} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p,$$

et en utilisant la relation (1.30).

- *Conservation de l'énergie du mouvement décorrélé :*

On choisit ici $\psi = \frac{1}{2} (c_{p,i} - \check{u}_{p,i}) (c_{p,i} - \check{u}_{p,i})$. Comme dans le cas présent, ψ dépend de l'espace et du temps, alors on utilise l'équation (1.20) à laquelle on ajoute les termes (1.21). Après calcul, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{\theta}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{\theta}_p \check{u}_{p,j} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \delta \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{S}_{p,ij} - \frac{2}{\check{\tau}_p} \check{\theta}_p \\ &\quad - \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{R}_{p,ij}^* \frac{\partial}{\partial x_j} \check{u}_{p,i} - \frac{2}{3} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{\theta}_p \frac{\partial}{\partial x_j} \check{u}_{p,j} \\ &\quad + \check{n}_p \left\{ \frac{1}{2} \frac{dm_p}{dt} \delta u_{p,i} \delta u_{p,i} \right\}_p + \mathbb{C}(\frac{1}{2} m_p \delta u_{p,i} \delta u_{p,i}) \end{aligned} \quad (1.32)$$

Dans les équations (1.31) et (1.32), $\delta \check{R}_{p,ij}^*$ est la partie déviatrice du tenseur des vitesses décorrélées. Celui-ci est modélisé puisqu'il n'est pas transporté. Le modèle intégré dans AVBP est basé sur une hypothèse d'équilibre local du tenseur des vitesses décorrélées (moment d'ordre 2) et en négligeant toute contribution des moments d'ordre supérieur. En supposant, en outre, que la partie déviatrice de $\delta \check{R}_{ij}$ est petite devant la partie sphérique, alors on peut modéliser ce tenseur par un terme visqueux [226, 192] :

$$\delta \check{R}_{p,ij}^* = \nu_{RUM} \left(\frac{\partial \check{u}_{p,j}}{\partial x_i} + \frac{\partial \check{u}_{p,i}}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial \check{u}_{p,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (1.33)$$

où ν_{RUM} est une viscosité liée au mouvement décorrélé et qui s'écrit :

$$\nu_{RUM} = \frac{\check{\tau}_p}{3} \delta \check{\theta}_p$$

Il faut d'autre part modéliser la contribution du 3^{eme} moment $\delta \check{S}_{p,ijk}$. Kaufman [109] propose de le modéliser par analogie à la loi de Fick et :

$$\delta \check{S}_{p,ij} = -\kappa_{RUM} \frac{\partial}{\partial x_j} \delta \check{\theta}_p$$

où κ_{RUM} est un coefficient de diffusion écrit par Simonin [225] :

$$\kappa_{RUM} = \frac{10}{27} \check{\tau}_p \delta \check{\theta}_p$$

- *Conservation de l'enthalpie sensible corrélée :*

On pose $\psi = C_{p,p}\zeta_p$. On obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p \check{h}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \check{h}_p \check{u}_{p,j} &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \langle \delta h_{s,p} \delta \check{u}_{p,j} \rangle_p - \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dh_{s,p}}{dt} \right\rangle_p \\ &+ \check{n}_p \left\{ \frac{dm_p}{dt} \check{h}_p \right\}_p + \mathbb{C}(m_p \check{h}_p) \end{aligned} \quad (1.34)$$

Nature des équations

Kaufmann [109] a étudié le système d'équations obtenu précédemment dans un cas monodisperse, monodimensionnel, sans termes sources, de couplage ou visqueux. Après simplification, on obtient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_p + \frac{\partial}{\partial x} \check{n}_p \check{u}_p = 0 \quad (1.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_p \check{u}_p + \frac{\partial}{\partial x} \check{n}_p \check{u}_p \check{u}_p = - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p \quad (1.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p + \frac{\partial}{\partial x} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p \check{u}_p = - \frac{2}{3} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p \frac{\partial}{\partial x} \check{u}_p \quad (1.37)$$

Par analogie avec les équations d'Euler, Kaufmann [109] interprète le terme de droite des équations (1.36) et (1.37) comme une pression $\check{p}_{RUM} = \frac{2}{3} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p$ puis introduit par analogie avec la phase gazeuse une vitesse de propagation similaire à la vitesse de son c :

$$\check{c}_p = \sqrt{\frac{10}{9} \delta \check{\theta}_p}.$$

Ainsi les valeurs propres du système (1.35)-(1.37) s'écrivent :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \check{u}_p + \check{c}_p \\ \lambda_2 &= \check{u}_p \\ \lambda_3 &= \check{u}_p - \check{c}_p \end{aligned}$$

Les valeurs propres étant réelles et différentes, on a donc un système hyperbolique strict, très proche des équations d'Euler. Il convient d'ailleurs de faire une remarque supplémentaire. Si les particules sont incompressibles (par exemple des gouttes de kérosène), le comportement mésoscopique de la phase discrète ne l'est pas du tout. Le mouvement d'ensemble des gouttes a, au contraire, des similitudes avec un écoulement fortement compressible [109, 146] et la formation d'amas de particules fait penser à des chocs. En outre, on a très souvent : $|\check{u}_p| \gg \check{c}_p$.

Ainsi, il paraît envisageable d'utiliser les méthodes de résolution classiques employées pour la simulation des écoulements compressibles [101], comme on y reviendra plus tard.

1.2.7 Termes d'échange entre les phases et modèles

Dans cette thèse, on réalise des simulations d'écoulements diphasiques dans les chambres de combustion. Les particules sont donc des gouttes et on présente ici les modèles utilisés pour fermer les termes d'échange à l'interface. Ceux-ci sont obtenus sous les hypothèses suivantes :

- La température est homogène dans une particule, ce qui équivaut à supposer que la conductivité est infinie.
- Ici la gravité est négligée.
- Comme on l’a évoqué précédemment, toutes les gouttes possèdent localement le même diamètre : le spray est monodisperse.
- Toutes les gouttes ont localement la même température.

Echange de masse

Les termes de variation d’une quantité mésoscopique $\check{\psi}$ due à un transfert de masse sont notés dans les équations (1.28) à (1.34) :

$$\check{\Gamma}_{p,\psi} = \check{n}_p \left\{ \frac{dm_p}{dt} \psi \right\}_p \quad (1.38)$$

Dans l’approche monodisperse choisie ici, les seules variations de masse des particules sont dues à l’évaporation. Ainsi, le terme $\check{\Gamma}_{p,\psi}$ représente le flux convectif de $\check{\psi}$ dû au changement de phase. Il s’exprime à partir du flux de masse liquide évaporé $\check{\Gamma} = -\check{n}_p \left\{ \frac{dm_p}{dt} \right\}_p$:

$$\check{\Gamma}_{p,\psi} = -\check{\psi} \check{\Gamma} \quad (1.39)$$

On suppose en outre que les gouttes sont sphériques. Le transfert de masse est donc modélisé par la loi de Spalding [229], valable pour une goutte isolée et sphérique :

$$\check{\Gamma} = \check{\alpha}_p \frac{6}{d_p^2} Sh(\rho D_k) \ln(1 + B_M) \quad (1.40)$$

où ρ est la masse volumique de la phase porteuse, D_k est la diffusivité de la k -ième espèce du mélange gazeux (qui constitue la goutte sous forme gazeuse). Le nombre de Sherwood Sh est défini par :

$$Sh = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Sc_k^{1/2} \quad (1.41)$$

avec $Re_p = \frac{\check{d}_p ||\vec{u}_p - \vec{u}||}{\nu}$ le nombre de Reynolds des particules, où ν est la viscosité cinématique de la phase porteuse, et Sc_k le nombre de Schmidt de l’espèce k et $Sc_k = \frac{\nu}{D_k}$.

Le nombre de masse ou nombre de Spalding B_M est égal à :

$$B_M = \frac{Y_{k,\Sigma} - Y_{k,\infty}}{1 - Y_{k,\Sigma}} \quad (1.42)$$

où Y_k est la fraction massique de l’espèce k , l’indice Σ indique une valeur prise à l’interface liquide-gaz et ∞ désigne la valeur loin de la goutte. La grandeur $Y_{k,\Sigma}$ est calculée de la manière suivante :

$$Y_{k,\Sigma} = p_{k,\Sigma} W_k \frac{\sum_{j \neq k} Y_j / W_j}{(1 - Y_k)(p - p_{k,\Sigma}) + p_{F,\Sigma} W_k \sum_{j \neq k} Y_j / W_j} \quad (1.43)$$

où W_j est la masse molaire de l'espèce j , p la pression dans la phase porteuse et $p_{k,\Sigma}$ est la pression partielle de l'espèce k à l'interface définie par l'équation de Clasius-Clapeyron :

$$p_{k,\Sigma} = p_{CC} \exp \left(\frac{W_k \Delta H}{R} \left(\frac{1}{T_{CC}} - \frac{1}{\check{T}_p} \right) \right) \quad (1.44)$$

où p_{CC} et T_{CC} représentent la pression et la température de référence correspondant aux conditions de saturation, ΔH est la chaleur latente de vaporisation et R est la constante des gaz.

On a donc, dans les équations considérées, les termes sources suivants :

- *Conservation de la fraction volumique :*

$$\check{\Gamma}_{p,1} = -\Gamma$$

- *Conservation de la quantité de mouvement :*

$$\vec{\Gamma}_{p,\vec{c}_p} = -\Gamma \vec{u}$$

- *Conservation de l'enthalpie mésoscopique :*

$$\check{\Gamma}_{p,\zeta_p} = -\Gamma \check{h}_{s,p}$$

Conduction de l'enthalpie

Le terme d'échange d'enthalpie du liquide vers le gaz par conduction est dû au gradient de température à l'interface. Dans l'équation d'enthalpie sensible mésoscopique (1.34), il correspond à $-\rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dh_{s,p}}{dt} \right\rangle_p$.

$$\Phi(T_{p,\Sigma}) = \check{\alpha}_p \lambda Nu \frac{6}{d_p^2} (T_{p,\Sigma} - T) \quad (1.45)$$

avec Nu correspond au nombre de Nusselt dans la phase gazeuse, λ au coefficient de conductivité dans la phase porteuse. On fait ici l'hypothèse que le nombre de Lewis est unitaire, on a donc : $Sh = Nu$.

Traînée

On se place toujours dans le cas d'un écoulement monodisperse. Le temps de relaxation $\check{\tau}_p$ des particules supposées sphériques est calculé en fonction du coefficient de traînée. On a alors :

$$\check{\tau}_p = \frac{4}{3} \frac{\rho_p \check{d}_p^3}{\rho \nu} \frac{1}{C_d Re_p} \quad (1.46)$$

C_d est le coefficient de traînée de la goutte et se calcule de la manière suivante :

$$C_d = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) \quad \text{pour} \quad Re_p < 1000 \quad (1.47)$$

$$C_d = 0.438 \quad \text{pour} \quad Re_p \geq 1000 \quad (1.48)$$

et l'équation (1.47) provient de la loi empirique de Schiller et Nauman [209].

1.2.8 Simplifications pour la suite et discussion

Traînée et couplage inverse

On rappelle deux des hypothèses majeures qui ont permis d'écrire les équations de conservation pour la phase dispersée :

- L'écoulement est dilué ($\alpha_p < 10^{-2}$). Les effets d'encombrement volumique des particules dans la phase porteuse sont négligés soit $1 - \alpha_p \simeq 1$.
- La conséquence de l'hypothèse précédente est qu'on suppose qu'il n'y a pas d'interaction entre les gouttes (collisions et tous les phénomènes qui en découlent comme la rupture ou la coalescence). Tous les termes $\mathbb{C}$ sont donc nuls.
- La phase porteuse n'est pas (ou peu) altérée par le spray, d'où l'utilisation d'une *fdp* conditionnée par la réalisation $\mathcal{H}_f$.

A partir d'une fraction volumique α_p d'environ 10^{-4} , il existe un couplage inverse de la traînée, c'est-à-dire de la phase dispersée vers la phase porteuse. Tant que ce terme n'induit que de faibles perturbations sur le gaz, il n'est pas nécessaire de changer le raisonnement mené jusqu'ici. En revanche, si le couplage est plus fort, il est alors nécessaire de redéfinir tout le cadre de travail et utiliser une *fdp* jointe gaz-particule [70].

Mouvement décorrélé

Compte tenu de l'avancement actuel de la modélisation du mouvement décorrélé, on a choisi de ne pas en tenir compte dans les simulations réalisées dans cette thèse. En effet, si les résultats obtenus par Riber [192] confirment la pertinence des modèles liés au mouvement décorrélé dans le cas d'une THI, il n'en est plus de même dans des cas de jets diphasiques turbulents et confinés. En effet, le terme $\check{R}_{p,ij}^*$ modélisé par un terme visqueux est surestimé dans les zones de forts gradients moyens de vitesses mésoscopiques corrélées. Ce problème n'apparaissait pas dans la THI puisqu'il n'y a pas de gradients moyens. Un filtrage passe-haut (à la manière du calcul de la viscosité turbulente dans le modèle de Smagorinsky filtré - voir section 2.2.3) pourrait réduire la quantité de diffusion introduite par le modèle en supprimant la composante moyenne des gradients de vitesses corrélées et rendant ainsi le calcul de $\check{R}_{p,ij}^*$ plus local. Ce test n'a pas cependant été mené dans cette thèse.

Polydispersion

Dans une chambre de combustion, la polydispersion influence fortement le mélange turbulent d'un carburant injecté sous forme liquide (dans la dispersion puis l'évaporation des gouttes) [188]. Tout d'abord, les gouttes ne suivent pas la même trajectoire en fonction de leur taille. Le nombre de Stokes

permet de comparer les temps caractéristiques de convection τ_{conv} et de traînée τ_p :

$$St = \frac{\tau_{conv}}{\tau_p} \quad (1.49)$$

Il est commun de dire que pour un nombre de Stokes très inférieur à 1, les gouttes se comportent comme des traceurs et, à l'inverse, pour un nombre Stokes grand devant 1, étant très inertielles, elles ont tendance à suivre leurs propres trajectoires, peu influencées par l'écoulement porteur. De ce fait, si la granulométrie est très étalée, on peut s'attendre à des comportements très différents. En outre, l'évaporation est très différente selon les tailles des gouttes. Les petites gouttes s'évaporent beaucoup plus vite que les grosses, qui peuvent être vues comme des réservoirs de fuel.

Il existe un modèle implanté dans AVBP permettant la description de gouttes de diamètres différents au sein d'un même volume de contrôle. Celui-ci a été introduit par Mossa [154] et repose sur une *fdp* avec une répartition présumée des diamètres des gouttes. La construction de la *fdp* nécessite, par ailleurs, le transport d'une seule équation supplémentaire (densité de surface de liquide). Cette méthodologie, pour accéder à la polydispersion, a montré des résultats intéressants concernant la distribution du carburant dans une chambre de combustion réelle. Les effets de ségrégation par la traînée sont bien capturés, au moins qualitativement. Cependant, il semble que cette modélisation reste problématique en cas d'évaporation et les calculs très peu stables. Or dans cette thèse, le but est de réaliser la LES d'un écoulement diphasique réactif, c'est pourquoi ce modèle ne sera pas utilisé.

Certaines alternatives existent pour traiter à la fois l'évaporation et la polydispersion [189, 57]. A ce titre, la méthode multi-fluide dont les principes sont rappelés dans [57] (limitation aux moments d'ordre 0 et 1 de la vitesse, discrétisation dans l'espace des phases des tailles de gouttes) permet d'obtenir de très bons résultats en comparaison des méthodes lagrangiennes. Il lui reste, tout de même, un défaut qu'on évoque au paragraphe suivant et qui va permettre d'introduire une dernière méthode Eulérienne, toujours très proche des précédentes.

Croisements de jets

Les LES diphasiques réalisées avec AVBP dans des configurations complexes (y compris celle présentée à la fin de cette thèse) sont réalisées SANS utiliser les modèles liés au mouvement décorrélié. Si on se réfère à l'équation (1.31), cela revient à supprimer, non seulement, un terme visqueux (ce qui rend la résolution plus ardue car on enlève une partie stabilisatrice), mais aussi et surtout, à enlever un terme de pression. On obtient donc, au même titre que la méthode multi-fluide, une équation proche de l'équation de Burgers non linéaire et non visqueuse. Par ailleurs, l'étude du paragraphe 1.2.6 indique que le système obtenu (l'équation de transport de l'énergie du mouvement décorrélié a disparu) est désormais hyperbolique non strict. Le système correspond aux équations de description d'un gaz sans pression qui peut faire apparaître des δ -chocs, c'est-à-dire des singularités dans la solution (le nombre de gouttes ou la fraction volumique peuvent tendre vers l'infini !).

Ce problème apparaît car le système ne permet pas le croisement de particules, ne considérant en un point qu'une vitesse à la fois et montre l'intérêt de la prise en compte du mouvement décorrélié. Il existe des corrections permettant d'introduire un terme assimilable à une pression dans l'équation de quantité de mouvement de la phase dispersée (voir Février [69] ou Kaufmann [109]) et permettant de s'affranchir d'une équation de transport supplémentaire mais ça n'est toutefois pas toujours suffisant.

On évoque donc ici une dernière approche Eulérienne pour décrire la phase dispersée nommée DQ-MOM (pour *direct quadrature method of moments*). Celle-ci consiste à approximer la *fdp* par une somme de distribution de Dirac dans l'espace des phases [61, 186] et permet d'écrire les différents moments (des vitesses, des tailles de gouttes...) sous forme de quadratures comme suit :

$$\langle V_p^k u_p^l v_p^m w_p^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} V_p^k u_p^l v_p^m w_p^n f_p(V_p, \vec{u}_p) dV_p d\vec{u}_p \quad (1.50)$$

$$\simeq \sum_{i=1}^N \omega_i V_{p,i}^k u_{p,i}^l v_{p,i}^m w_{p,i}^n \quad (1.51)$$

où V_p est le volume des particules, k, l, m, n sont des entiers positifs et ω_i sont des poids. Cette méthode, bien qu'assez complexe à mettre en place, permet, entre autres, de considérer plusieurs vitesses en une position donnée et d'éviter ainsi le problème des δ -chocs.

Chapitre 2

LES de la combustion diphasique

2.1 Equations de la combustion laminaire et monophasique

Le chapitre 1 a décrit une formulation pour la phase dispersée en écoulement diphasique. On présente ici l'ensemble des équations pour la phase dispersée et le gaz ainsi que leur filtrage en LES. Dans un premier temps, on décrit les équations de Navier-Stokes pour les fluides compressibles sous forme conservative (comme on peut les trouver dans les livres classiques tels que [100, 10]). Ces équations sont non filtrées, telles qu'elles sont utilisées pour réaliser des simulations numériques directes.

2.1.1 Equations de conservation

Dans ce chapitre, on utilise les notations indicielles pour décrire les équations régissant le mouvement des fluides compressibles, en adoptant la règle de sommation d'Einstein (l'indice d'une variable apparaissant deux fois dans un terme sous-entend la sommation sur toutes les valeurs que peut prendre cet indice). On notera cependant que l'indice k est réservé pour désigner la k -ième espèce et ne suit pas cette règle (sauf si on indique le contraire).

L'ensemble des équations de conservation décrivant l'évolution d'un écoulement compressible avec réactions chimiques s'écrit :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [p \delta_{ij} - \tau_{ij}], \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho E u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [u_i (p \delta_{ij} - \tau_{ij}) + q_j] + \dot{\omega}_T + Q_r, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_k u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [J_{j,k}] + \dot{\omega}_k. \quad (2.3)$$

Les équations (2.1)-(2.3) traduisent respectivement la conservation de la quantité de mouvement (vecteur ρu_i), de l'énergie totale (ρE) et des densités partielles des espèces ($\rho_k = \rho Y_k$, pour $k = 1, \dots, N$ et N est ici le nombre d'espèces), avec ρ la masse volumique du mélange. Le terme source dans l'équation de l'énergie totale, (Eq. 2.2), est décomposé en un terme source chimique et un terme de radiation. Ce

dernier n'étant pas utilisé dans cette thèse, on ne reviendra pas sur son expression et on aura désormais $Q_r = 0$.

Il est courant de décomposer le tenseur des flux en une partie convective et une partie visqueuse. On introduit en outre le vecteur : $\mathbf{U} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T$, qui permettra (voir partie II) d'écrire les équations de manière compacte et de décrire plus aisément les méthodes numériques :

Termes convectifs ou non visqueux :

$$\mathbf{F}^C = \begin{pmatrix} \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ \rho Eu + p u \\ \rho_k u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}^C = \begin{pmatrix} \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ \rho Ev + p v \\ \rho_k v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}^C = \begin{pmatrix} \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ \rho Ew + p w \\ \rho_k w \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

où la pression hydrostatique p est donnée par l'équation d'état pour un gaz parfait (Eq. 2.13).

Termes visqueux :

Les composantes des tenseurs des flux visqueux ont la forme suivante :

$$\mathbf{F}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xz} \\ -(u \tau_{xx} + v \tau_{xy} + w \tau_{xz}) + q_x \\ J_{x,k} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{G}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u \tau_{xy} + v \tau_{yy} + w \tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{H}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xz} \\ -\tau_{yz} \\ -\tau_{zz} \\ -(u \tau_{xz} + v \tau_{yz} + w \tau_{zz}) + q_z \\ J_{z,k} \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

$J_{j,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k et est présenté section 2.1.3 (Eq. 2.24). Le tenseur des contraintes τ_{ij} est explicité dans le paragraphe 2.1.4 (Eq. 2.25). Enfin, la partie 2.1.5 décrit le flux de chaleur q_j (Eq. 2.28).

L'état de référence standard qu'on utilise est $P_0 = 1$ bar et $T_0 = 0$ K. Les enthalpies sensibles massiques ($h_{s,k}$) et entropies massiques (s_k) sont tabulées pour 51 valeurs de température (T_i avec $i = 1, \dots, 51$) allant de 0 K à 5000 K avec un pas de 100 K. Ainsi, ces variables peuvent être évaluées de la manière

suivante :

$$h_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{p,k} dT = \frac{h_{s,k}^m(T_i) - h_{s,k}^m(T_0)}{W_k}, \quad \text{et} \quad (2.7)$$

$$s_k(T_i) = \frac{s_k^m(T_i) - s_k^m(T_0)}{W_k}, \quad \text{avec } i = 1, 51 \quad (2.8)$$

Les exposants m correspondent aux valeurs molaires. Les valeurs tabulées pour $h_{s,k}(T_i)$ et $s_k(T_i)$ peuvent être trouvées dans les tables JANAF [236]. L'énergie sensible de chaque espèce peut être reconstruite en suivant l'expression :

$$e_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{v,k} dT = h_{s,k}(T_i) - r_k T_i \quad i = 1, 51 \quad (2.9)$$

On note que les capacités calorifiques massiques à pression constante : $c_{p,k}$ et à volume constant : $c_{v,k}$ sont supposées constantes entre T_i et $T_{i+1} = T_i + 100$. Elles sont définies comme étant la pente de l'enthalpie sensible ($C_{p,k} = \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T}$) et de l'énergie sensible ($C_{v,k} = \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T}$).

L'énergie sensible varie ainsi continûment avec la température et est obtenue par interpolation linéaire.

$$e_{s,k}(T) = e_{s,k}(T_i) + (T - T_i) \frac{e_{s,k}(T_{i+1}) - e_{s,k}(T_i)}{T_{i+1} - T_i} \quad (2.10)$$

L'énergie et l'enthalpie sensibles du mélange sont données par :

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^N \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k e_{s,k} \quad (2.11)$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^N \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k h_{s,k} \quad (2.12)$$

2.1.2 Equation d'état

L'équation d'état pour un mélange gazeux idéal est écrite :

$$p = \rho r T \quad (2.13)$$

où r est la constante des gaz du mélange, fonction de l'espace et du temps, et égale à : $r = \frac{R}{W}$, où W est la masse molaire moyenne du mélange :

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.14)$$

La constante des gaz r et les capacités calorifiques du mélange dépendent de la composition locale de celui-ci :

$$r = \frac{R}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} R = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (2.15)$$

$$C_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (2.16)$$

$$C_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (2.17)$$

où $R = 8.3143 \text{ J/mol.K}$ est la constante universelle des gaz. Le coefficient polytropique du mélange est donné par : $\gamma = C_p/C_v$. La constante des gaz, les capacités calorifiques et le coefficient polytropique ne sont pas constants : ils dépendent de la composition, donc des fractions massiques locales : $Y_k(x, t)$:

$$r = r(\vec{x}, t), \quad C_p = C_p(\vec{x}, t), \quad C_v = C_v(x, t), \quad \text{et} \quad \gamma = \gamma(\vec{x}, t) \quad (2.18)$$

On calcule la température à partir de l'énergie sensible en utilisant les équations (2.10) et (2.11). Comme on le verra plus tard, les conditions limites utilisent la vitesse du son du mélange, définie par :

$$c^2 = \gamma r T \quad (2.19)$$

2.1.3 Conservation de la masse : flux diffusif des espèces

Dans un écoulement d'un fluide multi-espèces, la conservation de la masse implique :

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_i^k = 0 \quad (2.20)$$

où V_i^k sont les composantes dans les directions ($i=1,2,3$) des vitesses de diffusion des espèces k . Elles sont souvent exprimées, à l'aide de l'approximation de Hirschfelder Curtis, comme des fonctions des gradients des espèces :

$$X_k V_i^k = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad (2.21)$$

où X_k est la fraction molaire de l'espèce k : $X_k = Y_k W/W_k$. En termes de fractions massiques, l'approximation (2.21) peut être écrite :

$$Y_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad (2.22)$$

En sommant l'équation (2.22) sur tous les k , on remarque que l'approximation (2.22) n'est pas nécessairement compatible avec l'équation (2.20) qui exprime la conservation de la masse. Pour la

conservation globale, une correction de la vitesse de diffusion est ajoutée à la vitesse de convection (voir [176]) :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad (2.23)$$

Finalement , le flux diffusif de chaque espèce k prend la forme :

$$J_{i,k} = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right), \quad (2.24)$$

Ici, les D_k sont coefficients de diffusion de chaque espèce k dans le mélange (voir section 2.1.6).

2.1.4 Tenseur des contraintes visqueuses

Le tenseur des contraintes τ_{ij} est donné par les relations :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right), \quad (2.25)$$

et

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad (2.26)$$

L'équation (2.25) peut être aussi écrite :

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \frac{2\mu}{3} \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial w}{\partial z} \right), & \tau_{xy} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \tau_{yy} &= \frac{2\mu}{3} \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial z} \right), & \tau_{xz} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \tau_{zz} &= \frac{2\mu}{3} \left(2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right), & \tau_{yz} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (2.27)$$

où μ est la viscosité dynamique (voir section 2.1.6)

2.1.5 Vecteur flux de chaleur

Pour un mélange multi-espèces, un flux de chaleur additionnel doit être considéré ¹. Celui-ci est dû au transport de chaleur par diffusion des espèces. Le flux total s'écrit donc :

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{Conduction}} + \underbrace{-\rho \sum_{k=1}^N \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{\text{Diffusion des espèces}} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N J_{i,k} h_{s,k}, \quad (2.28)$$

où λ est la conductivité thermique du mélange. Le second terme est donc un ajout au flux classique de chaleur.

¹Ici on ne considère ni les effets Soret, ni les effets Dufour

2.1.6 Coefficient de transport

Dans les codes de CFD pour les écoulements multi-espèces, la viscosité dynamique μ est souvent supposée indépendante de la composition du mélange et proche de celle de l'air², afin d'utiliser la loi de Sutherland. On fait la même hypothèse dans le code AVBP. On obtient :

$$\mu = c_1 \frac{T^{3/2}}{T + c_2} \frac{T_{ref} + c_2}{T_{ref}^{3/2}} \quad (2.29)$$

où c_1 et c_2 sont déterminées afin de correspondre à la viscosité réelle du mélange. Pour de l'air à $T_{ref} = 273$ K, on fixe $c_1 = 1.71 \cdot 10^{-5}$ kg/m.s et $c_2 = 110.4$ K (voir [259]). Une seconde loi, appelée loi en puissance, est aussi disponible :

$$\mu = c_1 \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (2.30)$$

avec b compris entre 0.5 et 1.0. Par exemple, $b = 0.76$ pour l'air. La conductivité thermique du mélange peut être calculée à l'aide du nombre de Prandtl Pr du mélange :

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{Pr} \quad (2.31)$$

avec Pr supposé constant en temps et en espace et fixé par l'utilisateur.

Le calcul des coefficients de diffusion des espèces D_k est un problème bien spécifique. Ces coefficients devraient être exprimés comme une fonction de coefficients binaires D_{ij} obtenus via la théorie cinétique des gaz (Hirschfelder et al. [102]). Dans AVBP, les coefficients de diffusion D_k de l'espèce k dans le mélange sont calculés suivant Bird et al. [20] :

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^N X_j / D_{jk}} \quad (2.32)$$

Les coefficients D_{ij} sont des fonctions complexes de collision entre molécules et des variables thermodynamiques. Pour un code de DNS utilisant une chimie complexe, utiliser (2.32) a un sens. Toutefois, dans la majorité des cas, les DNS emploient des schémas cinétiques simplifiés et une modélisation fine de ces coefficients a moins d'intérêt. Ainsi, une simplification est adoptée dans AVBP pour le calcul des D_k . Les nombres de Schmidt Sc_k des espèces sont supposés constants en espace et en temps (comme le nombre de Prandtl) afin de calculer les coefficients pour chaque espèce de la manière suivante :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (2.33)$$

Les valeurs utilisées des nombres de Schmidt et de Prandtl sont celles fournies pour les gaz brûlés par des codes de calcul comme PREMIX ou COSILAB.

²Ce qui introduit des erreurs moins grandes que celles liées aux propriétés thermodynamiques.

2.1.7 Cinétique chimique

Les termes sources des équations (2.2) et (2.3) sont écrits respectivement :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_T \\ \dot{\omega}_k \end{pmatrix}$$

où $\dot{\omega}_T$ est le taux de dégagement de chaleur et $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction des espèces k . Le modèle de combustion employé dans AVBP est la loi d'Arrhenius écrite pour N réactifs et M réactions :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj}, \quad j = 1, M \quad (2.34)$$

Les taux de réaction des espèces k sont la somme des taux $\dot{\omega}_{kj}$ produits par les M réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (2.35)$$

où $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$ et $\mathcal{Q}_j$ est le taux d'avancement de la réaction j et s'écrit³ :

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (2.36)$$

$K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les taux de réaction direct et inverse de la réaction j :

$$K_{f,j} = A_{f,j} \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{RT}\right) \quad (2.37)$$

où $A_{f,j}$ et $E_{a,j}$ sont respectivement la constante pré-exponentielle et l'énergie d'activation. $K_{r,j}$ se déduit de l'hypothèse d'équilibre :

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \quad (2.38)$$

où K_{eq} est la constante d'équilibre définie par Kuo [115] :

$$K_{eq} = \left(\frac{P_0}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp \left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT} \right) \quad (2.39)$$

avec $P_0 = 1$ bar. ΔH_j^0 and ΔS_j^0 sont l'enthalpie (sensible + chimique) et l'entropie globale de la réaction j :

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (2.40)$$

³Cette formule est valable pour des réactions élémentaires. En revanche quand on considère des réactions globales, les coefficients ν'_{kj} et ν''_{kj} sont remplacés par des valeurs ajustées.

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k s_k(T) \quad (2.41)$$

où $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie massique de formation des espèces k à la température de référence $T_0 = 0$ K.

Le taux de dégagement de chaleur est finalement défini par :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.42)$$

Epaississement du front de flamme : le modèle TF pour la DNS

Dans certaines DNS, il peut s'avérer utile d'être capable de simuler la propagation d'un front de flamme sans pour autant avoir à résoudre exactement sa structure. On peut citer deux méthodes pour réaliser ce type de calcul :

- La flamme peut être traitée comme une interface ayant une épaisseur nulle comme ce qui est fait avec le modèle de l'équation de G. Celui-ci implique le transport d'une fonction distance notée G [176] permettant de localiser la flamme.
- Le front de flamme est épaissi afin d'être résolu sur le maillage.

Dans AVBP, le modèle TF (pour *Thickened flame* [12, 44, 123, 122, 253]) est appliqué pour résoudre la zone réactionnelle en utilisant la loi d'Arrhénius.

L'équation de transport pour la fraction massique de l'espèce k , en utilisant les équations (2.23) et (2.24) est donnée par :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (u_i + V_i^c) Y_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.43)$$

où $\dot{\omega}_k$ est le taux de réaction pour l'espèce k . Pour une flamme laminaire, les termes diffusifs $\vec{\nabla} J_k$ et les termes de réaction des espèces $\dot{\omega}_k$ s'équilibrent.

Les analyses dimensionnelles classiques [260] montrent que la vitesse de flamme laminaire S_L^0 et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 sont contrôlées par les termes de diffusion et les termes sources :

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th} A} \quad (2.44)$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (2.45)$$

où A est la constante pré-exponentielle de la réaction. Pour une flamme laminaire, les diffusivités thermiques et moléculaires D_{th} and D_k sont remplacées par $\mathcal{F} D_{th}$ and $\mathcal{F} D_k$ et les termes sources des réactions $\dot{\omega}_k$ par $\frac{\dot{\omega}_k}{\mathcal{F}}$, où $\mathcal{F}$ est le facteur d'épaississement. L'équation (2.43) devient alors :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (u_i + V_i^c) Y_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \mathcal{F} D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \frac{\dot{\omega}_k}{\mathcal{F}} \quad (2.46)$$

avec

$$V_i^c = \sum_{k=1}^n \mathcal{F} D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.47)$$

Les équations (2.44) et (2.45) montrent que la vitesse de flamme laminaire reste la même que lorsqu'il n'y a pas d'épaississement, tandis que son épaisseur est multipliée par le facteur $\mathcal{F}$. Le facteur d'épaississement est déterminé en fonction du maillage utilisé pour le calcul et fourni comme paramètre par l'utilisateur. Sa valeur, dans le cas d'écoulements turbulents, sera discutée dans la section suivante.

2.2 Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase porteuse

2.2.1 Le principe de la LES

La simulation aux grandes échelles (SGE) ou en anglais *Large Eddy Simulation* (LES) [177, 206] est désormais reconnue comme une alternative aux méthodologies RANS classiques (pour *Reynolds Averaged Navier-Stokes*). Bien que reposant sur des approches différentes, les deux méthodes ont le même but : écrire un nouveau système d'équations permettant de décrire les caractéristiques des écoulements turbulents.

Le développement de ce nouveau système d'équations est obtenu en introduisant des opérateurs qu'on applique aux équations de Navier-Stokes. Cette étape fait apparaître des termes qu'il faut fermer en utilisant des modèles, afin de pouvoir résoudre le problème. La différence principale entre RANS et LES vient de l'opérateur employé. Dans les méthodes RANS, l'opération consiste à utiliser une moyenne sur l'ensemble des réalisations de l'écoulement étudié [40, 177], qu'on remplace souvent, sous l'hypothèse d'ergodicité, par une moyenne temporelle. Les termes non fermés sont représentatifs des phénomènes physiques qui ont lieu sur tout le spectre de l'ensemble des réalisations considérées. Dans le cas de la LES, l'opérateur est un filtre de taille Δ , localisé dans l'espace et indépendant par rapport au temps, qui sépare les grandes (dont la taille est supérieure à celle de filtre) et les petites échelles. Les termes non fermés sont alors représentatifs des phénomènes physiques associés aux petites structures (de hautes fréquences) présentes dans l'écoulement. La figure 2.1 illustre les différences entre RANS (a) et LES (b) lorsque ces méthodes sont appliquées à un champ turbulent homogène et isotrope (THI).

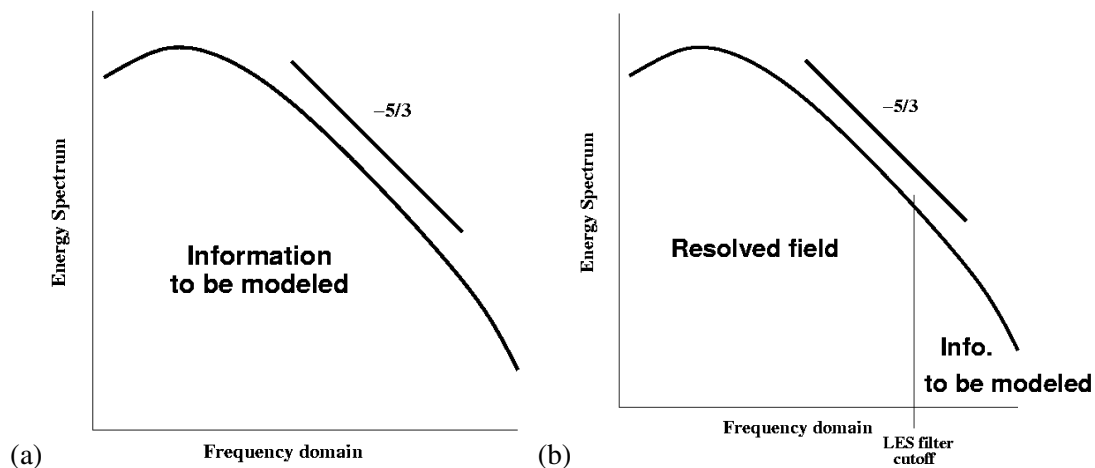


FIG. 2.1 - Représentation conceptuelle de l'application des méthodes RANS (a) et LES (b) à une THI (on montre le spectre de l'énergie cinétique turbulente).

Grâce au filtrage, la LES permet une représentation dynamique du mouvement des grandes échelles dont la contribution est cruciale dans les géométries complexes. Les prédictions des écoulements turbulents via la LES sont, de ce fait, plus proches de la physique car les phénomènes de grande échelle comme les gros tourbillons et les ondes acoustiques font partie intégrante des solutions obtenues en résolvant les équations de Navier-Stokes filtrées [176].

Pour toutes ces raisons, la LES a un très grand potentiel pour réaliser la description des écoulements turbulents qu'on rencontre dans les applications industrielles. Ces possibilités sont néanmoins réduites

par les hypothèses introduites lors de la mise au point des modèles LES. Dans la suite, on décrit les équations résolues dans AVBP pour les LES des écoulements réactifs.

2.2.2 Equations filtrées pour les écoulements non réactifs

Les grandeurs filtrées $\bar{f}$ sont définies comme le produit de convolution entre la grandeur instantanée f et un filtre G_Δ de taille caractéristique Δ :

$$\bar{f}(\vec{x}, t) = \int f(\vec{y}, t) G_\Delta(\vec{x} - \vec{y}) d\vec{y} \quad (2.48)$$

$\bar{f}$ est la grandeur résolue dans les simulations numériques tandis que les quantités de sous-maille $f' = f - \bar{f}$ ne le sont pas. On notera que dans AVBP, aucun filtre n'est appliqué explicitement. Celui-ci est implicite et est la conséquence de la résolution des équations sur un domaine discrétisé. Pour les écoulements à densité ρ variable, on introduit le filtrage pondéré par la masse volumique (notation : $\tilde{f}$) par analogie avec la moyenne de Favre :

$$\bar{\rho} \tilde{f} = \overline{\rho f} \quad (2.49)$$

Les équations de conservation pour la LES sont obtenues en appliquant le filtre sur les équations de conservations décrites section 2.1.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{P} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij} - \bar{\tau}_{ij}^t], \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{E} \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{u_i (P \delta_{ij} - \tau_{ij})} + \bar{q}_j + \bar{q}_j^t] + \bar{\omega}_T + \bar{Q}_r, \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{J}_{j,k} + \bar{J}_{j,k}^t] + \bar{\omega}_k, \quad (2.52)$$

et la règle d'Einstein est appliquée pour les indices répétés. On rappelle que dans cette section, comme dans la précédente, l'indice k est réservé à la k -ième espèce et ne suit pas la règle susmentionnée.

Dans les équations (2.50), (2.51) et (2.52), le tenseur des flux peut être divisé en trois parties : non visqueuse (ou convective), visqueuse et turbulente de sous-maille. On donne leur expression :

Termes non visqueux :

Les composantes du flux non visqueux sont les mêmes que celles utilisées en DNS mais basées sur les quantités filtrées. Le vecteur des variables conservatives filtrées s'écrit : $\bar{\mathbf{U}} = (\bar{\rho} \tilde{u}, \bar{\rho} \tilde{v}, \bar{\rho} \tilde{w}, \bar{\rho} \tilde{E}, \bar{\rho} \tilde{Y}_k)$:

$$\bar{\mathbf{F}}^C = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u}^2 + \bar{p} \\ \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{v} \\ \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{E} \tilde{u} + \bar{p} \tilde{u} \\ \bar{\rho}_k \tilde{u} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{G}}^C = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{v} \\ \bar{\rho} \tilde{v}^2 + \bar{p} \\ \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{E} \tilde{v} + \bar{p} \tilde{v} \\ \bar{\rho}_k \tilde{v} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{H}}^C = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{w}^2 + \bar{p} \\ \bar{\rho} \tilde{E} \tilde{w} + \bar{p} \tilde{w} \\ \bar{\rho}_k \tilde{w} \end{pmatrix}, \quad (2.53)$$

Termes visqueux :

Les termes visqueux s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 \bar{\mathbf{F}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}} \\ -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{xz}} \\ -(\overline{u \tau_{xx}} + \overline{v \tau_{xy}} + \overline{w \tau_{xz}}) + \overline{q_x} \\ \overline{J_{x,k}} \end{pmatrix} \\
 \bar{\mathbf{G}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{yy}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -(\overline{u \tau_{xy}} + \overline{v \tau_{yy}} + \overline{w \tau_{yz}}) + \overline{q_y} \\ \overline{J_{y,k}} \end{pmatrix} \\
 \bar{\mathbf{H}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -\overline{\tau_{zz}} \\ -(\overline{u \tau_{xz}} + \overline{v \tau_{yz}} + \overline{w \tau_{zz}}) + \overline{q_z} \\ \overline{J_{z,k}} \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

Le filtrage des équations de conservation fait en outre apparaître des termes non fermés qu'il est nécessaire de modéliser :

Termes de turbulence de sous-maille :

Ses composantes s'expriment de la manière suivante :

$$\bar{\mathbf{F}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}}^t \\ -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{xz}}^t \\ \overline{q_x}^t \\ \overline{J_{x,k}}^t \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{G}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{yy}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ \overline{q_y}^t \\ \overline{J_{y,k}}^t \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{H}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ -\overline{\tau_{zz}}^t \\ \overline{q_z}^t \\ \overline{J_{z,k}}^t \end{pmatrix}, \tag{2.55}$$

Les termes visqueux filtrés pour les écoulements non réactifs

Les termes de diffusion filtrés sont les suivants (voir T. Poinso et D. Veynante, Chapitre 4 [176]) :

– Le tenseur des contraintes visqueuses laminaires $\widetilde{\tau}_{ij}$ est donné par les relations qui suivent :

$$\begin{aligned}
 \overline{\tau_{ij}} &= \overline{2\mu(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll})}, \\
 &\approx 2\overline{\mu}(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll}),
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

et

$$\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j}), \tag{2.57}$$

L'équation (2.56) peut être réécrite :

$$\begin{aligned}\overline{\tau_{xx}} &\approx \frac{2\bar{\mu}}{3} \left(2\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right), & \overline{\tau_{xy}} &\approx \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right) \\ \overline{\tau_{yy}} &\approx \frac{2\bar{\mu}}{3} \left(2\frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right), & \overline{\tau_{xz}} &\approx \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \right) \\ \overline{\tau_{zz}} &\approx \frac{2\bar{\mu}}{3} \left(2\frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} - \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right), & \overline{\tau_{yz}} &\approx \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial y} \right)\end{aligned}\quad (2.58)$$

qui correspondent aux termes qu'on a fait apparaître pour exprimer le tenseur de flux visqueux (Eq.(2.54)).

- Le terme de diffusion des espèces est donné par (dans le cas d'un écoulement non-réactif) :

$$\begin{aligned}\overline{J_{i,k}} &= -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \\ &\approx -\bar{\rho} \left(\bar{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right),\end{aligned}\quad (2.59)$$

et on suppose que les corrélations d'ordre élevé entre les différentes variables sont négligeables.

- Le flux de chaleur filtré s'écrit :

$$\begin{aligned}\overline{q_i} &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k} h_{s,k}} \\ &\approx -\bar{\lambda} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}} \tilde{h}_{s,k}\end{aligned}\quad (2.60)$$

Ces équations supposent que les variations spatiales des flux diffusifs d'espèces sont négligeables et peuvent être modélisées comme de simples gradients.

Termes de turbulence de sous-maille pour la LES des écoulements non réactifs

Comme on l'a mentionné précédemment, l'opération de filtrage fait apparaître des termes à fermer (voir Eq.(2.55)) qu'on nomme termes de "sous-maille" (en anglais SGS : *sub-grid scales*) et qu'il faut modéliser afin de pouvoir résoudre le problème.

- Le tenseur de Reynolds est défini par :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j), \quad (2.61)$$

et modélisé de la façon suivante :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = 2 \bar{\rho} \nu_t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{ll} \right), \quad (2.62)$$

Le calcul de ν_t est expliqué par la suite.

- Le vecteur flux diffusif de sous-maille des espèces s'écrit :

$$\overline{J_{i,k}}^t = \bar{\rho} (\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k), \quad (2.63)$$

$\overline{J_{i,k}}^t$ est modélisé comme suit :

$$\overline{J_{i,k}}^t = -\bar{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^{c,t} \right), \quad (2.64)$$

avec

$$D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_k^t} \quad (2.65)$$

Le nombre de Schmidt turbulent $Sc_k^t = 1$ est le même pour toutes les espèces et est fixé dans le code (comme Pr^t). Il faut noter de plus qu'avoir un seul nombre de Schmidt turbulent pour toutes les espèces n'implique pas forcément $\tilde{V}^{c,t} = 0$ à cause du terme W_k/W dans (2.64).

– Le flux de chaleur de sous-maille est donné par :

$$\overline{q_i}^t = \overline{\rho}(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u_i} \widetilde{E}), \quad (2.66)$$

où e est l'énergie sensible. Sa modélisation est la suivante :

$$\overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}}^t \widetilde{h_{s,k}}, \quad (2.67)$$

avec

$$\lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr^t}. \quad (2.68)$$

Le choix du Prandtl turbulent dépend du type d'écoulement étudié. Moin [145] indique que les valeurs pour une THI sont aux alentours de 0.5 (pour l'air). Avec les méthodes RANS, le choix est souvent $Pr^t = 0.9$.

Dans AVBP, les vitesses de diffusion de correction sont obtenues comme suit :

$$\widetilde{V}_i^c + \widetilde{V}_i^{c,t} = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\overline{\mu}}{\overline{\rho} Sc_k} + \frac{\mu_t}{\overline{\rho} Sc_k^t} \right) \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i}, \quad (2.69)$$

et les équations(2.33) et (2.65) sont employées.

2.2.3 Modèles pour le tenseur des contraintes de sous-maille $\overline{\tau_{ij}}^t$:

Les modèles utilisés en LES proviennent de théories dans lesquelles on suppose que le filtre de sous-maille est invariant en temps ET en espace. Ainsi, les effets de maillages non-uniformes ou mobiles ne sont pas pris en compte dans ces modèles. Des discussions concernant les erreurs de commutation entre les opérateurs de dérivées et le filtrage peuvent être trouvées dans [250, 157, 155]. La seule prise en compte du changement de topologie des cellules est indirecte, via la définition de la taille du filtre Δ faisant intervenir le volume des cellules.

En principe, les modèles LES interdisent l'utilisation de viscosité artificielle ou même d'un schéma numérique de convection introduisant de la diffusion numérique (exception faite des modèles MILES qui utilisent la diffusion numérique du schéma [77, 78]). En pratique, on peut faire fi de cette interdiction, à condition que les diffusions artificielles ou numériques soient faibles devant celle introduite par le modèle LES.

Les équations de Navier-Stokes filtrées font apparaître des tenseurs et vecteurs de sous-maille décrivant l'interaction entre les échelles résolues et non-résolues. Leur influence sur le mouvement résolu est prise en compte par l'introduction d'une viscosité turbulente ν_t à travers les contributions de sous-maille. Une telle approche suppose que l'effet des échelles de sous-maille sur les structures résolues est purement dissipatif. Cette hypothèse prévaut principalement dans le cadre de la théorie de la cascade d'énergie turbulente introduite par Kolmogorov [112]. Le modèle de sous-maille classique fait intervenir la notion de viscosité turbulente et s'écrit :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\overline{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}) \quad (2.70)$$

$$= 2 \overline{\rho} \nu_t \widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3} \overline{\rho} \nu_t^t \delta_{ij}, \quad (2.71)$$

avec

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (2.72)$$

et $\overline{\tau_{ij}}^t$ est le tenseur de sous-maille, ν_t est la viscosité turbulente, $\tilde{u}_i$ est la grandeur filtrée de Favre (pour les écoulements compressibles) et $\tilde{S}_{ij}$ est le tenseur des taux de déformations résolus (partie symétrique du tenseur gradient des vitesses). La littérature est particulièrement riche en modèle de turbulence pour la LES et en particulier pour les fluides incompressibles [82, 84, 83, 85]. On présente les différents modèles présents dans AVBP pour exprimer la viscosité turbulente.

Modèle de Smagorinsky

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}}, \quad (2.73)$$

Δ est la taille caractéristique du filtre, prise égale à : $\Delta = (V_e)^{1/3}$ (V_e est le volume d'une cellule), C_S est la constante de Smagorinsky. Sa valeur peut varier entre 0.1 et 0.18, en fonction de l'écoulement étudié. Le modèle de Smagorinsky [228] a été développé dans les années 60 [131] et testé depuis dans de nombreuses configurations différentes. Ce modèle de fermeture fournit exactement le bon taux de dissipation d'énergie cinétique dans le cas d'une THI. Sa popularité vient de sa simplicité d'utilisation avant tout. Néanmoins, il est aussi réputé pour être généralement trop dissipatif [85, 206]. Le calcul de la viscosité turbulente étant basé sur le tenseur $\tilde{S}$, celle-ci devient trop importante en présence de forts gradients moyens (qu'on peut rencontrer dans les couches de mélange et près des parois). Ainsi, le modèle de Smagorinsky peut introduire de la viscosité turbulente dans une zone de fort cisaillement, même si l'écoulement est laminaire [85]. Il vaut donc mieux éviter d'utiliser ce modèle pour simuler la transition à la turbulence [206].

Modèle de Smagorinsky filtré

$$\nu_t = (C_{S_F} \Delta)^2 \sqrt{2 \mathcal{F}_{PH}(\tilde{S}_{ij}) \mathcal{F}_{PH}(\tilde{S}_{ij})}, \quad (2.74)$$

où Δ est la taille caractéristique du filtre (racine cubique du volume d'une cellule), $C_{S_F} = 0.37$ est la constante du modèle (à l'instar de C_S pour le modèle précédent) et $\mathcal{F}_{PH}(\tilde{S}_{ij})$ est le tenseur des taux de déformation résolu et filtré ($\mathcal{F}_{PH}$ étant un filtre passe-haut). Ce modèle a été développé afin d'obtenir une représentation plus locale et donc plus fidèle des phénomènes turbulents, le filtre permettant, par exemple, d'éliminer une composante moyenne de cisaillement (et éviter de mettre une viscosité turbulente là où il n'en faut pas !). Avec ce modèle, la transition vers la turbulence est mieux prédite.

Modèle WALE (Wall Adapting Local Eddy-viscosity)

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij}, \quad (2.75)$$

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}}, \quad (2.76)$$

où Δ est la taille caractéristique du filtre (racine cubique du volume d'une cellule), $C_w = 0.4929$ est la constante du modèle et $\tilde{g}_{ij}$ est le gradient des vitesses résolues. Ce modèle a été introduit par Nicoud et Ducros [162]. Le but est d'obtenir un comportement réaliste de la viscosité turbulente en zone proche paroi et une transition correcte vers la turbulence, deux des principaux points faibles du modèle de Smagorinsky.

Autres modèles

On a présenté les trois principaux modèles utilisés dans AVBP. Colin et Albouze ont implanté le modèle dynamique de Smagorinsky décrit par Germano [85] et Lilly [132]. Celui-ci a été développé pour pallier aux défauts du modèle d'origine. L'objectif est une détermination plus exacte du niveau de viscosité turbulente à introduire. La constante (qui, pour le coup, n'est plus constante) de Smagorinsky est recalculée localement en faisant intervenir un deuxième niveau de filtrage. En effet, l'utilisation du deuxième filtre $G_{\Delta'}$ de taille caractéristique Δ' supérieure à celle du premier permet d'obtenir une zone du spectre d'énergie cinétique qui est résolue lors de l'utilisation du filtre G_{Δ} et modélisée avec $G_{\Delta'}$. Après quelques manipulations algébriques, on peut donc en déduire la valeur de C_S .

Moureau [157] a, quant à lui, implanté l'équation de k (énergie cinétique turbulente). En résolvant le transport de l'énergie cinétique turbulente, on peut en effet écrire une viscosité turbulente.

Il convient de noter que la majorité des modèles permettant le calcul de ν_t et présentés ici provient de théories basées sur la turbulence en écoulements incompressibles. Il existe des modèles, comme on va le rappeler par la suite, permettant de prendre en compte les effets de dilatation de sous-maille [145, 230, 67]. Ainsi pendant cette thèse, le modèle de Yoshizawa [262, 145] a été implanté par A. Roux et l'auteur de ce manuscrit. Les écoulements dans les configurations présentées dans cette thèse ne nécessitant pas l'utilisation de ce modèle (pour la phase porteuse), on ne rentrera pas plus dans les détails.

2.2.4 Le modèle de flamme épaissie

Un problème est rencontré en LES pour les flammes prémélangées : l'épaisseur δ_L^0 est généralement bien plus petite que la taille caractéristique d'une maille (qu'on notera h). Pour cette raison, le modèle flamme épaissie (TF - pour *thickened flame*) a été développé afin de permettre la résolution du front de flamme. Dans la section 2.1.7, l'épaississement de la flamme laminaire de δ_L^0 à $\mathcal{F} \delta_L^0$ a été présenté. Dans les écoulements turbulents, l'interaction entre la turbulence et la chimie est altérée : les échelles plus petites que $\mathcal{F} \delta_L^0$ n'interagissent plus avec la flamme. De ce fait, l'épaississement réduit le plissement de la flamme par les tourbillons. De plus, comme la surface de flamme est réduite (du fait du plissement diminué artificiellement), le taux de réaction est sous-estimé. Pour corriger cet effet, une fonction d'efficacité notée $\mathcal{E}$ a été ajoutée par Colin [46] afin de contrecarrer l'effet de l'épaississement. Celle-ci a été développée à partir de résultats de DNS (voir figure 2.2).

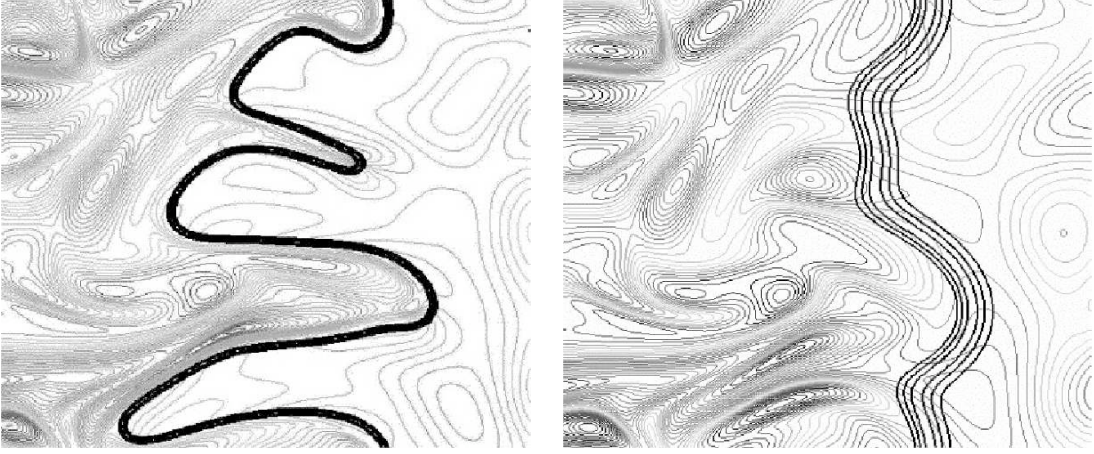


FIG. 2.2 - Simulation Numérique Directe (SND ou DNS) des interactions flamme / turbulence ([12], [176]). A gauche : front non épaissi. A droite : flamme épaissie avec $\mathcal{F} = 5$.

Modèle de combustion de sous-maille - fonction d'efficacité : $\mathcal{E}$

Une description complète de la fonction d'efficacité est fournie dans [46]. La philosophie du modèle peut être résumée en trois étapes :

- Le facteur de plissement de la surface de flamme Ξ est estimé à partir de la densité de surface de flamme $\bar{\Sigma}$, en supposant un équilibre entre turbulence et surface de flamme de sous-maille, ce qui donne :

$$\Xi \simeq 1 + \alpha \frac{\Delta_e}{S_L^0} \langle a_T \rangle_s \quad (2.77)$$

où $\langle a_T \rangle_s$ est le taux de déformation de sous-maille, Δ_e est la taille du filtre et α est une constante du modèle.

- $\langle a_T \rangle_s$ est estimé à partir de la taille Δ_e du filtre et d'une vitesse turbulente de sous-maille u'_{Δ_e} :

$$\langle a_T \rangle_s = \Gamma u'_{\Delta_e} / \Delta_e,$$

et la fonction Γ correspond à la contribution au taux de déformation de toutes les échelles affectées par l'épaississement, c'est-à-dire de l'échelle de Kolmogorov η_K jusqu'à l'échelle correspondant à la taille du filtre Δ_e (voir [141]). Γ est donc égale :

$$\Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) = 0.75 \exp \left[- \frac{1.2}{(u'_{\Delta_e} / S_L^0)^{0.3}} \right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (2.78)$$

Au final, la fonction d'efficacité est définie comme le ratio entre le plissement de flamme de référence (non épaissi) et celui de la flamme épaissie :

$$\mathcal{E} = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\delta_L^1)} = \frac{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}}{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}} \quad (2.79)$$

S_L^0 et δ_L^0 sont respectivement la vitesse et l'épaisseur de flamme laminaire lorsque $\mathcal{F} = 1$ et $\delta_L^1 = \mathcal{F} \delta_L^0$.

$\mathcal{E}$ varie entre 1 (faible intensité turbulente) et $\mathcal{E}_{max} \simeq \mathcal{F}^{2/3}$ (plissement de sous-maille important). Dans les zones turbulentes prémélangées, la fonction d'efficacité est déterminée pour assurer que la vitesse de flamme turbulente est égale à $S_T = \mathcal{E} S_L^0$. Colin et al. [46] font en outre apparaître une échelle de coupure δ_L^c telle que tout tourbillon de taille inférieure à δ_L^c n'affecte pas le plissement de la flamme. Ainsi la fonction d'efficacité est utilisée si la taille caractéristique r d'un tourbillon qui atteint la flamme est telle que :

- $\delta_L^0 > r > \delta_L^c$ si la flamme n'est pas épaissie
- $\delta_L^1 = \beta \mathcal{F} \delta_L^0 > r > \delta_L^c$ si la flamme est épaissie et β est une constante du modèle.
- La taille Δ_e du filtre correspond à la plus grande échelle qui affecte la flamme épaissie. En pratique, on a souvent : $\Delta_e = 10\Delta$ où $\Delta = \sqrt[3]{V_e}$ est une taille caractéristique. La vitesse caractéristique de sous-maille u'_{Δ_e} est estimée à partir du rotationnel de la vitesse résolue (afin d'éliminer la partie dilation de la vitesse qu'on ne compte pas ici comme faisant partie de la turbulence). L'opérateur permettant de définir u'_{Δ_e} est le suivant :

$$u'_{\Delta_e} = c_2 \Delta^3 \left| \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j} \left(\epsilon_{lmn} \frac{\partial \bar{u}_n}{\partial x_m} \right) \right| \quad (2.80)$$

avec $c_2 \approx 2$ et où ϵ_{lmn} correspond au tenseur des permutations.

Estimation de la constante α

La constante α est estimée pour obtenir le bon comportement asymptotique de Ξ en fonction des fluctuations de vitesse RMS u' , pour des flammes minces lorsque Δ_e tend vers l'échelle intégrale l_t . Normalement, Ξ doit tendre vers Ξ_{max} défini par (2.81) :

$$\Xi_{max} = 1 + \beta u' / S_L^0 \quad (2.81)$$

avec u' la vitesse turbulente correspondant à l'échelle intégrale. On en déduit α à partir de (2.81) :

$$\alpha = \beta \frac{2 \ln(2)}{3 c_{ms} [Re_t^{1/2} - 1]} \quad (2.82)$$

et le nombre de Reynolds turbulent est donné par : $Re_t = \frac{u' l_t}{\nu}$. c_{ms} est égale à 0.28. Il existe différentes manières de définir α et β . Plus d'informations peuvent être trouvées dans [46] ou [39].

Modèle de flamme épaissie standard (modèle TF)

On écrit ici les équations filtrées de l'énergie totale et de conservation des espèces (équations (2.51 et (2.52) qu'on a modifiées pour prendre en compte les écoulements réactifs lorsqu'on utilise les modèles TF et DTF (pour *dynamic thickened flame*). Dans ce cas, seules les équations filtrées pour la quantité de mouvement (Eq.(2.50)) ne sont pas modifiées. Pour les équations d'énergie et d'espèces, on *remplace* les équations filtrées par les équations avec épaississement. Les différents flux et termes sources intervenant sont les suivants :

Termes visqueux

- Le flux diffusif d'espèces est donné par :

$$\overline{J_{i,k}} = - \mathcal{E} \mathcal{F} \frac{\bar{\mu}}{S_{C_k}} \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} + \bar{\rho}_k \tilde{V}_i^c, \quad (2.83)$$

avec :

$$\tilde{V}_i^c = \mathcal{E} \mathcal{F} \sum_{k=1}^N \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} S c_k} \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i}, \quad (2.84)$$

– Le flux de chaleur est défini par :

$$\bar{q}_i = - \mathcal{E} \mathcal{F} \frac{\bar{\mu} C_p}{Pr} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}} \tilde{h}_{s,k}, \quad (2.85)$$

Termes sources :

Le vecteur terme source de l'équation (2.49) s'écrit :

$$\bar{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\mathcal{E} \dot{\omega}_T(\tilde{Y}_k, \tilde{T})}{\mathcal{F}} \\ \frac{\mathcal{E} \dot{\omega}_k(\tilde{Y}_k, \tilde{T})}{\mathcal{F}} \end{pmatrix}, \quad (2.86)$$

où $\dot{\omega}_T(\tilde{Y}_k, \tilde{T})$ et $\dot{\omega}_k(\tilde{Y}_k, \tilde{T})$ sont les taux de réaction calculés à l'aide de la loi d'Arrhénius et des quantités filtrées $\tilde{Y}_k$ et $\tilde{T}$. Il faut noter que ce modèle ne devrait être utilisé que pour des cas parfaitement prémélangés car le mélange des gaz frais est modifié par l'épaississement et n'est pas prédit correctement par les grandeurs filtrées.

Epaississement dynamique pour la LES (modèle DTFLES)

Le modèle TF est adéquat pour la simulation des flammes parfaitement prémélangées. En revanche, pour les cas partiellement prémélangés, il ne s'avère guère adapté et doit être revu pour plusieurs raisons :

- Dans les zones non réactives où seul le mélange a lieu, les diffusions thermiques et moléculaires sont surestimées par le facteur $\mathcal{F}$. Dans ces zones, l'épaississement devrait être égal à 1. En outre, les contributions de sous-maille des flux de chaleur et d'espèce devraient être prises en compte (car elles sont supprimées dans les équations de l'énergie et des espèces dès que l'épaississement est plus grand que 1).
- Dans la flamme, l'épaississement permet de résoudre la diffusion et les termes sources. Ainsi, les termes de sous-maille peuvent être annulés.

En d'autres mots, le modèle TF doit rester inchangé dans la flamme mais doit être adapté à l'extérieur de la flamme. Ainsi le modèle DTF (épaississement dynamique) a été développé pour tenir compte de ces remarques [123]. Son application est décrite sur la figure 2.2.4. Le facteur d'épaississement n'est plus une constante et varie de 1 à $\mathcal{F}_{max}$ (des zones non réactives aux zones réactives), comme l'indique l'équation qui suit :

$$\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{max} - 1) \mathcal{S} \quad (2.87)$$

où $\mathcal{S}$ est un senseur dépendant de la température locale et des fractions massiques et qui s'écrit :

$$\mathcal{S} = \tanh(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}) \quad (2.88)$$

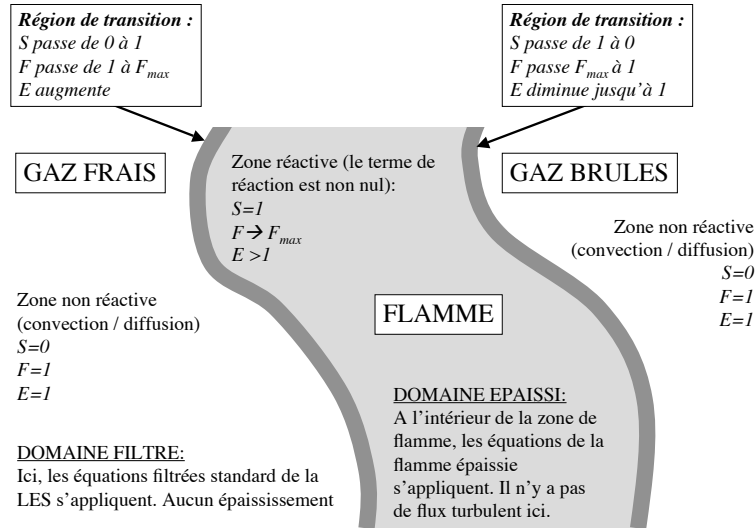


FIG. 2.3 - Représentation schématique des différentes régions qu'on rencontre dans une flamme partiellement prémélangée et comportement du modèle DTF.

où Ω est une fonction détectant la présence du front de réaction. Une méthode pour construire Ω est basée sur l'utilisation des paramètres du schéma cinétique utilisé :

$$\Omega = Y_F^{\nu'_F} Y_O^{\nu'_O} \exp(-\Gamma_T \frac{E_a}{RT}) \quad (2.89)$$

La constante Γ_T est utilisée afin de déclencher l'épaississement avant la zone réactive et a une valeur typiquement aux alentours de 0.5. Le facteur β' est pris égal à 500 dans AVBP. Enfin on note que S varie de 0 (zones non réactives) à 1 (flamme).

Au final, on obtient les équations suivantes :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{P} \delta_{ij} - 2 (\bar{\mu} + \mu_t) (\tilde{S}_{ij} - 1/3 \tilde{S}_{ll} \delta_{ij}) \right], \\
 \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{E} \tilde{u}_j) &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{u}_i \bar{P} \delta_{ij} - 2 \bar{\mu} \tilde{u}_i (\tilde{S}_{ij} - 1/3 \tilde{S}_{ll} \delta_{ij}) \right] \\
 &\quad + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[C_p \left(\mathcal{E} \mathcal{F} \frac{\bar{\mu}}{Pr} + (1 - S) \frac{\mu_t}{Pr^t} \right) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right] \\
 &\quad + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\sum_{k=1}^N \left(\left[\mathcal{E} \mathcal{F} \frac{\bar{\mu}}{Sc_k} + (1 - S) \frac{\mu_t}{Sc_k^t} \right] \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{Y}_k (\tilde{V}_j^c + \tilde{V}_j^{c,t}) \right) \tilde{h}_{s,k} \right] \\
 &\quad + \frac{\mathcal{E} \dot{\omega}_T}{\mathcal{F}}, \\
 \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mathcal{E} \mathcal{F} \frac{\bar{\mu}}{Sc_k} + (1 - S) \frac{\mu_t}{Sc_k^t} \right) \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{Y}_k (\tilde{V}_j^c + \tilde{V}_j^{c,t}) \right] \\
 &\quad + \frac{\mathcal{E} \dot{\omega}_k}{\mathcal{F}},
 \end{aligned} \tag{2.90}$$

qu'on peut aussi écrire sous forme compacte :

$$\boxed{\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} = \bar{\mathbf{S}}} \tag{2.91}$$

2.3 Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase dispersée

2.3.1 Filtrage des équations de la phase dispersée

La procédure est la même que pour la phase gazeuse. De la même manière, on introduit un filtrage de Favre en pondérant non plus par la masse volumique mais avec $\check{\alpha}_p$:

$$\bar{\alpha}_p \hat{f}_p = \overline{\check{\alpha}_p \check{f}_p} \quad (2.92)$$

où $\bar{\alpha}_p$ est la fraction volumique filtrée. Le filtrage de Favre utilisé par Riber [192] pour les écoulements monodisperses était basé sur une pondération avec $\check{n}_p$. Comme le souligne Boileau [21], on a équivalence entre les deux filtres si on fait l'hypothèse que l'écoulement est monodisperse à l'échelle du filtre, ce qui revient à négliger les effets de sous-maille de variance du diamètre. On a alors :

$$\overline{\check{n}_p \check{f}_p} = \overline{\frac{6\check{\alpha}_p}{\pi \check{d}^3} \check{f}_p} = \frac{6}{\pi \check{d}^3} \bar{\alpha}_p \hat{f}_p = \bar{n}_p \hat{f}_p \quad (2.93)$$

où $\bar{n}_p$ est la densité de goutte filtrée et $\check{d}$ est le diamètre mésoscopique pour lequel on a supposé que : $\check{d} = \check{d}'$, soit $\check{d}' = 0$.

On applique le filtre G_Δ aux équations de conservation décrite dans la section 1.2, ce qui donne :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \hat{u}_{p,j} = 0 \quad (2.94)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_p \bar{\alpha}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_{p,j} = -\bar{\Gamma} \quad (2.95)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_{p,i} \hat{u}_{p,j} = \frac{\rho_p \bar{\alpha}_p}{\bar{\tau}_p} (\tilde{u}_i - \hat{u}_{p,i}) - \bar{\Gamma} \hat{u}_{p,i} \quad (2.96)$$

$$\begin{aligned} & + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p (\widehat{u_{p,i} u_{p,j}} - \hat{u}_{p,i} \hat{u}_{p,j}) \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p \hat{u}_{p,j} & = -\pi \bar{n}_p \check{d}_p \bar{N} u \bar{\lambda} (\hat{T}_p - \tilde{T}) - \bar{\Gamma} \hat{h}_{s,F}(\hat{T}_p) \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p (\widehat{u_{p,j} h_p} - \hat{u}_{p,j} \hat{h}_p) \end{aligned} \quad (2.97)$$

On précise ici que tous les termes relatifs au mouvement décorrélé ont été négligés suite aux simplifications faites dans la section 1.2. Ainsi le terme $-\frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p \left(\frac{2}{3} \delta \hat{\theta}_p \delta_{ij} + \delta \hat{R}_{p,ij}^* \right)$ n'a pas été écrit dans l'équation de quantité de mouvement (2.96) et l'équation d'énergie décorrélée filtrée n'a pas été développée. Son expression, ainsi que les fermetures des termes de sous-maille, peuvent être trouvés dans les thèses de Moreau [146], Riber [192] et Boileau [21].

Le temps de relaxation est lui aussi obtenu en utilisant uniquement les grandeurs filtrées :

$$\bar{\tau}_p \approx \left(1 + 0.15 \overline{Re}_p^{0.687}\right) \frac{\rho_p \check{d}_p^3}{18\mu} \quad (2.98)$$

$$\text{avec } \overline{Re}_p \approx \frac{\|\vec{u} - \vec{u}_p\| \check{d}_p}{\bar{\nu}} \quad (2.99)$$

On note que les termes sources filtrés (traînée, évaporation, conduction) ne font intervenir *que les grandeurs filtrées* dans leurs expressions. On néglige ainsi tout terme de sous-maille dans leur cas. Le lecteur peut trouver plus de détails sur ces approximations dans la thèse de M.Boileau [21].

Deux termes de sous-maille apparaissent dans les équations (2.96) et (2.97) :

- $\overline{\tau}_{p,ij}^t$ est le tenseur des contraintes de sous-maille pour la phase dispersée, apparaît dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (2.96) et s'exprime de la manière suivante :

$$\overline{\tau}_{p,ij}^t = -\rho_p \bar{\alpha}_p \left(\widehat{u_{p,i} u_{p,j}} - \widehat{u}_{p,i} \widehat{u}_{p,j} \right) \quad (2.100)$$

- $\overline{q}_{h,i}^t$ est le vecteur flux de sous-maille d'enthalpie sensible corrélée :

$$\overline{q}_{h,i}^t = \rho_p \bar{\alpha}_p \left(\widehat{u_{p,j} \delta \theta_p} - \widehat{u}_{p,j} \widehat{\delta \theta_p} \right) \quad (2.101)$$

Les termes de sous-maille d'enthalpie seront par la suite considérés comme négligeables donc on pose : $\overline{q}_{h,i}^t = 0$. Il reste donc à fermer : $\overline{\tau}_{p,ij}^t$.

2.3.2 Modèle pour le tenseur des contraintes de sous-maille $\overline{\tau}_{p,ij}^t$

A l'instar des tensions de Reynolds dans l'équation filtrée de quantité de mouvement de la phase porteuse, il apparaît le terme $\overline{\tau}_{p,ij}^t$ dans l'équation (2.96). Par analogie avec les modèles LES utilisés pour la phase porteuse, Riber et al. [193] proposent de modéliser le tenseur de sous-maille $\overline{\tau}_{p,ij}^t$ par un modèle de viscosité de type Smagorinsky. Néanmoins, le comportement de la phase discrète, comme on l'a évoqué dans le chapitre 1, est similaire à celui d'un fluide très compressible (les clusters de particules évoquant les chocs). La partie dilatation des vitesses mésoscopiques étant non négligeable, Riber et al [193] ont proposé de modéliser les effets de compression de sous-maille à l'aide du modèle de Yoshizawa. Le tenseur des contraintes de sous-maille pour la phase dispersée est donc modélisé comme suit :

$$\overline{\tau}_{p,ij}^t = \underbrace{\frac{2}{3} \rho_p \bar{\alpha}_p C_{p,Y} \Delta^2 |\widehat{\underline{\underline{S}}}_p|^2 \delta_{ij}}_{\text{Terme Yoshizawa}} - \underbrace{2 \rho_p \bar{\alpha}_p (C_{p,S} \Delta)^2 |\widehat{\underline{\underline{S}}}_p^*| \widehat{\underline{\underline{S}}}_p^*}_{\text{Terme Smagorinsky}} \quad (2.102)$$

$$= p_{p,t} \delta_{ij} - 2 \rho_p \bar{\alpha}_p \nu_{p,t} \widehat{\underline{\underline{S}}}_{p,ij}^* \quad (2.103)$$

et la norme de $\widehat{\underline{\underline{S}}}_p$ est donnée par : $|\widehat{\underline{\underline{S}}}_p| = \sqrt{2 \widehat{\underline{\underline{S}}}_{p,ij} \widehat{\underline{\underline{S}}}_{p,ij}}$. Les tenseurs des taux de déformations pour la phase dispersée sont ici définis par :

$$\begin{aligned} \widehat{\underline{\underline{S}}}_{p,ij}^* &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widehat{u}_{p,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{u}_{p,j}}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \widehat{u}_{p,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \\ \widehat{\underline{\underline{S}}}_{p,ij} &= \widehat{\underline{\underline{S}}}_{p,ij}^* + \frac{1}{3} \frac{\partial \widehat{u}_{p,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \end{aligned}$$

Les constantes du modèle ont été déterminées par Moreau et al [147] sur des tests *a priori* en turbulence homogène isotrope et on a : $C_{p,Y} = 0.116$ et $C_{p,S} = 0.16$.

A l'instar de ce qu'on a fait pour la phase gazeuse, on peut écrire les équations de la phase dispersée sous une forme compacte. Le vecteur des variables conservatives est :

$$\bar{\mathbf{U}}_p = (\bar{n}_p, \rho_p \bar{\alpha}_p, \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p, \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{v}_p, \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{w}_p, \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p)^T$$

et l'équation sous forme compacte peut s'écrire :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}_p}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\bar{\mathcal{F}}}_p = \bar{\mathbf{S}}_{f-p} \quad (2.104)$$

avec :

$$\bar{\mathbf{F}}_p^C = \begin{pmatrix} \bar{n}_p \hat{u}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \hat{u}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \hat{v}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p \hat{u}_p \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{G}}_p^C = \begin{pmatrix} \bar{n}_p \hat{v}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{v}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \hat{v}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{v}_p \hat{v}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{v}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p \hat{v}_p \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{H}}_p^C = \begin{pmatrix} \bar{n}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{v}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{w}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p \hat{w}_p \end{pmatrix}, \quad (2.105)$$

et les flux turbulents sont :

$$\bar{\mathbf{F}}_p^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau_{p,xx}}^t \\ -\overline{\tau_{p,xy}}^t \\ -\overline{\tau_{p,xz}}^t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{G}}_p^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau_{p,xy}}^t \\ -\overline{\tau_{p,yy}}^t \\ -\overline{\tau_{p,yz}}^t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{H}}_p^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau_{p,xz}}^t \\ -\overline{\tau_{p,yz}}^t \\ -\overline{\tau_{p,zz}}^t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.106)$$

2.3.3 Termes sources pour la phase gazeuse

Il reste à expliciter les termes sources de couplage pour le gaz, c'est-à-dire les termes sources qui apparaissent en plus dans l'équation (2.91) et traduisent les effets de la phase dispersée (traînée, conduction thermique, vaporisation) sur la phase porteuse. Ceux-ci s'écrivent [21] :

$$\bar{\mathbf{S}}_{p-f} = \begin{pmatrix} \bar{\Gamma} \hat{u} - \frac{\rho_p \bar{\alpha}_p}{\bar{\tau}_p} (\tilde{u} - \hat{u}_p) \\ \bar{\Gamma} \hat{v} - \frac{\rho_p \bar{\alpha}_p}{\bar{\tau}_p} (\tilde{v} - \hat{v}_p) \\ \bar{\Gamma} \hat{w} - \frac{\rho_p \bar{\alpha}_p}{\bar{\tau}_p} (\tilde{w} - \hat{w}_p) \\ \bar{\Gamma} h_{s,k} (\hat{T}_p) \delta_{pk} + \pi \bar{n}_p \check{d}_p N u \bar{\lambda} (\hat{T}_p - \tilde{T}) + \tilde{u}_i \left(\bar{\Gamma} \hat{u}_i - \frac{\rho_p \bar{\alpha}_p}{\bar{\tau}_p} (\tilde{u}_i - \hat{u}_{p,i}) \right) \\ \bar{\Gamma} \delta_{pk} \end{pmatrix} \quad (2.107)$$

et $\delta_{pk} = 1$ si les particules p sont constituées du composant k , $\delta_{pk} = 0$ sinon (dans ce manuscrit, il s'agira du carburant noté avec l'indice F). On a évidemment : $\bar{\mathbf{S}}_{p-f} = -\bar{\mathbf{S}}_{f-p}$.

2.3.4 Combustion et modification du terme d'évaporation

Le plissement dû à la turbulence a pour effet d'augmenter la surface de flamme et, par conséquent, le taux de réaction intégral. Le modèle de flamme épaissie permet de tenir compte du plissement provoqué par les tourbillons de sous-maille. L'effet de la turbulence en présence d'un écoulement diphasique n'est pas évident. Le taux de réaction dépend, en effet, de la vitesse de réaction chimique et du taux d'évaporation des gouttes de fuel [21]. Ce dernier dépend fortement de la température du gaz environnant et, lorsque la combustion est hétérogène, l'essentiel de l'évaporation peut se produire dans le front de flamme. Toutefois, il n'est pas évident que la relation entre le plissement et le taux d'évaporation soit similaire à celle entre plissement et taux de réaction. N'ayant aucune précision concernant ce phénomène, on n'inclura donc pas les effets du plissement sur l'évaporation. En pratique, le modèle TFLES consiste à corriger les termes de transfert de masse et de chaleur entre les deux phases en divisant par le facteur d'épaississement $\mathcal{F}$ [109] afin de garder la même structure que la flamme non épaissie.

$$\bar{\Gamma} \rightarrow \frac{\bar{\Gamma}}{\mathcal{F}} \quad (2.108)$$

$$\bar{\lambda} \rightarrow \frac{\bar{\lambda}}{\mathcal{F}} \quad (2.109)$$

Cette méthode, testée par A.Kaufmann [109], permet d'obtenir des flammes épaissies exactement similaires, à un facteur $\mathcal{F}$ près, aux flammes non épaissies.

Deuxième partie

Présentation et analyse numérique des schémas pour la LES de la combustion diphasique

Table des matières

3	Méthodes numériques pour la LES - Introduction	79
3.1	Schémas numériques pour la simulation aux grandes échelles	80
3.1.1	Maillages	80
3.1.2	Méthodes numériques pour les LES dans les géométries simples	81
3.1.3	Méthodes numériques pour les LES dans les géométries complexes	85
3.1.4	Cas particuliers : transport de scalaires et écoulements compressibles à nombres de Mach élevés	86
3.1.5	Autres méthodes numériques	87
3.2	Travail de la partie II	88
3.3	Tableau récapitulatif des schémas étudiés pendant cette thèse	88
4	Méthodes numériques pour la LES - le code AVBP	91
4.1	Introduction	91
4.1.1	Le code AVBP	91
4.1.2	Méthodes <i>cell-vertex</i> et ses concurrentes	91
4.2	Nomenclature	95
4.3	Equations résolues et calcul des métriques	96
4.3.1	Equations sous forme compacte	96
4.3.2	Discrétisation du domaine de calcul	97
4.3.3	Métriques	98
4.3.4	Calcul du résidu et équations aux noeuds	99
4.4	Les différents schémas de convection <i>cell-vertex</i>	100
4.4.1	Différences centrées (DC ou CV)	101
4.4.2	Lax-Wendroff (LW)	101
4.5	Méthodes des résidus distribués et éléments finis	103
4.5.1	Introduction	103
4.5.2	Méthodes <i>fluctuation splitting</i>	104
4.5.3	Schémas décentrés	105
4.5.4	Lien avec les éléments finis	108
4.5.5	Matrice de masse et intégration temporelle	110
4.5.6	Cas des systèmes d'équations non linéaires	111
4.6	Schémas de la famille Taylor-Galerkin	114

TABLE DES MATIÈRES

4.6.1	Euler-Taylor-Galerkin (ETG) pour la convection scalaire	114
4.6.2	Famille des schémas <i>Two-Step Taylor Galerkin</i> (TTG) - Système d'équations de conservation	117
4.6.3	Implantation dans AVBP	120
4.7	Schémas de convection pour la partie diphasique	121
4.8	Termes de diffusion	122
4.8.1	Opérateur <i>cell-vertex</i> (4Δ)	122
4.8.2	Opérateur (2Δ) - Méthode de Galerkin	124
4.9	Calcul des termes sources	125
4.10	Discretisation temporelle	127
4.10.1	Avancements temporels	127
4.10.2	Calcul du pas de temps	128
4.11	Viscosité artificielle	131
4.11.1	Viscosité artificielle du second ordre	131
4.11.2	Viscosité artificielle du quatrième ordre	133
4.11.3	Application des opérateurs de viscosité artificielle	134
4.11.4	Viscosités de compression	136
4.12	Schémas de bords et conditions aux limites	136
4.12.1	Schémas de bords	137
4.12.2	Conditions limites	139
5	Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - domaine périodique	145
5.1	Présentation du problème et notations	146
5.2	Analyse spectrale et équation résolue - étude monodimensionnelle	147
5.2.1	Quelques définitions	147
5.2.2	Analyse de Fourier et méthode de Von Neumann	149
5.2.3	Méthode de l'équation modifiée ou résolue	155
5.2.4	Application aux schémas d'AVBP	156
5.2.5	Diffusion ou Dissipation	160
5.3	Cas multidimensionnels	169
5.3.1	Anisotropie	169
5.3.2	Stabilité	170
5.4	Comparaisons des schémas d'AVBP- expériences numériques	172
5.4.1	Convection	173
5.4.2	Vortex	181
5.4.3	Onde acoustique linéaire	183
5.4.4	Viscosité artificielle	184
5.5	Conclusions et discussions	186
5.5.1	Sur les schémas d'AVBP	186
5.5.2	Sur leurs limitations concernant la résolution de la phase dispersée	188
5.5.3	Une voie de développement	188

6	Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - influence des conditions limites	191
6.1	Cavité acoustique 1D	192
6.1.1	Présentation du problème	192
6.1.2	Résultats avec le code AVBP	193
6.1.3	Différences entre les conditions limites	195
6.2	Méthode de la matrice d'amplification	196
6.2.1	Principe	196
6.2.2	Etude de stabilité	197
6.2.3	En pratique...	198
6.3	Application aux schémas d'AVBP	198
6.3.1	Equations d'Euler linéarisées	198
6.3.2	Discretisation au centre du domaine	199
6.3.3	Conditions limites et termes de bord	200
6.3.4	Discretisations aux bords	202
6.4	Résultats et comparaisons avec AVBP	205
6.4.1	Conditions de Dirichlet	205
6.4.2	Conditions caractéristiques	205
6.4.3	Conclusion	207
6.5	Améliorations possibles de la précision globale des schémas	208
6.5.1	Dérivées premières plus précises	208
6.5.2	Intégration temporelle d'ordre 2 aux bords	209
6.6	Conclusions	210
7	Application au foyer MERCATO (chambre de combustion académique)	213
7.1	Introduction - Contexte	213
7.2	Configurations	214
7.2.1	Configuration de base	214
7.2.2	Injecteur	215
7.2.3	Aval de la chambre	215
7.3	Géométrie A - écoulement monophasique	218
7.3.1	Caractéristiques du maillage et point de fonctionnement	218
7.3.2	Structure de l'écoulement	221
7.3.3	Comparaison entre les différents schémas numériques	236
7.3.4	Conclusions	241
7.4	Géométrie B - écoulement diphasique réactif	242
7.4.1	Conditions limites et initiale - partie gazeuse	242
7.4.2	Conditions limites et initiale - partie liquide	243
7.4.3	Maillage	245
7.4.4	Paramètres numériques	246
7.4.5	Chimie PEA	247
7.4.6	Grandeurs caractéristiques de l'écoulement	250
7.4.7	Structure de l'écoulement	250

TABLE DES MATIÈRES

7.4.8	Dispersion du carburant - Températures	257
7.4.9	Structure de flamme	260
7.4.10	Scénario de combustion	266
7.4.11	Calculs de viscosités	268
7.4.12	Conclusions	269

Chapitre 3

Méthodes numériques pour la LES - Introduction

La deuxième partie de ce manuscrit est consacrée à l'étude des méthodes numériques utilisées pour résoudre les systèmes d'équations permettant de décrire la combustion turbulente, diphasique et instationnaire. La simulation des grandes échelles de la turbulence (LES ou SGE) est l'outil qui a été choisi pour toutes les qualités dont il fait preuve et qui ont été énumérées dans la première partie. On peut distinguer deux types de LES de la combustion turbulente (diphasique ou non) :

- **LES dans les géométries simples** : l'objectif est d'étudier principalement les phénomènes fondamentaux qui se produisent dans ou près des flammes (interaction avec la turbulence, acoustique...). Les simulations sont très proches des DNS car réalisées dans des géométries très simples (domaines cubiques périodiques, canaux cylindriques ou parallélépipédiques...).
- **LES dans les géométries complexes** : il s'agit de simuler les écoulements réactifs dans des chambres de combustion plus ou moins complexes (de la chambre "académique" avec alimentation simple au brûleur industriel avec tourbillonneurs, films de refroidissement, contournements, parois multiperforées...).

La principale différence entre ces deux types de LES est le maillage que l'utilisateur va pouvoir employer. Dans le premier cas, les grilles sont structurées, le plus souvent orthogonales et généralement simples à mettre en place. Au contraire, les maillages utilisés pour les LES en géométries complexes sont majoritairement non structurés, composés le plus souvent d'éléments tétra- et/ou hexaédriques et peuvent demander plusieurs jours à semaines de travail pour les concevoir. Les données ne sont donc pas stockées de la même manière. De plus, les exigences en termes de performances ne sont pas du tout les mêmes. Ainsi, l'écriture de schémas numériques pour un type ou l'autre de LES est très différente. Dans ce chapitre et les 3 suivants, on va s'intéresser en particulier **aux schémas de convection**, car ce sont les plus susceptibles d'introduire des erreurs numériques et de générer des instabilités (donc la divergence du calcul). On présente ainsi différentes manières de caractériser un schéma (domaine de stabilité, précision...) et on introduit les différents types d'erreurs que peuvent engendrer les discrétisations et en particulier : *diffusion* ou *dissipation*¹ et *dispersion*.

Comme l'indiquent Oran et Boris[165], les termes *diffusion* et *dissipation* sont souvent utilisés pour désigner la même manifestation qu'est l'**erreur en amplitude** due au schéma numérique. D'un point de vue thermodynamique, pourtant, il s'agit bien de deux phénomènes différents. D'une manière rigoureuse, le terme le plus exact pour désigner l'erreur en amplitude correspond à la diffusion. Toutefois, comme le font la majorité des auteurs d'ouvrages de référence sur les méthodes numériques, on ne fera pas de distinction entre les deux termes.

3.1 Schémas numériques pour la simulation aux grandes échelles

3.1.1 Maillages

On peut distinguer deux types de maillages [100]. Ceux-ci se différencient principalement par la manière dont sont structurées les données (géométrie, solutions).

Structurés

Les maillages structurés (figure 3.1) proviennent de la méthode des différences finies et peuvent être aussi utilisés dans le cadre des volumes finis. Tout noeud ou point du maillage peut se définir comme l'intersection de deux (ou trois en 3D) familles de lignes. Il est donc aisé de connaître et de faire intervenir un grand nombre de points pour réaliser les discrétisations. Ces maillages peuvent être rectilignes ou curvilignes. Il est très courant d'utiliser les coordonnées cartésiennes mais les maillages en coordonnées cylindriques ne sont pas rares.

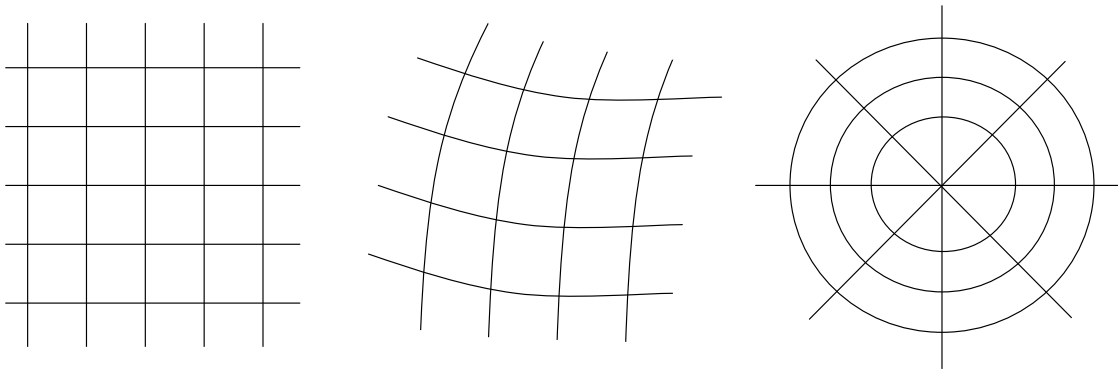


FIG. 3.1 - Trois exemples de maillages structurés. De gauche à droite : une grille cartésienne, curviligne et cylindrique.

Non-structurés

Les maillages non-structurés (figure 3.2) proviennent de la méthode des éléments finis. Le plus souvent, ils sont la combinaison d'éléments triangulaires et/ou quadrangulaires (ou tétraédriques et/ou hexaédriques), voire d'éléments plus complexes. Les noeuds ne peuvent pas être définis comme l'intersection de familles de lignes. A l'inverse des maillages précédents, il est généralement difficile (ou plutôt coûteux !) d'utiliser des noeuds très "éloignés" (non connectés entre eux par l'arête d'une cellule), ce qui peut limiter la précision des discrétisations.

Contrairement aux maillages structurés, un noeud ne peut donc pas être défini par un ensemble de deux (ou trois) entiers et doit donc être numéroté individuellement. De ce fait, il est nécessaire de lister les noeuds constituant chaque élément (numéroté lui-aussi). Les tableaux permettant de connaître ces liens entre noeuds et éléments sont appelés *tableaux de connectivité*.

On parle de maillages *hybrides* lorsque ceux-ci sont composés de plusieurs types d'éléments différents

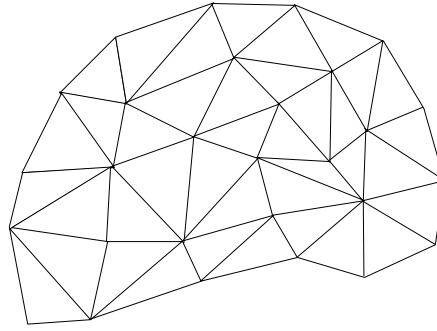


FIG. 3.2 - Exemple de maillage non structuré composé uniquement de triangles.

(par exemple, tétraèdres et hexaèdres). En général, les différents éléments utilisés sont limités aux éléments canoniques tels qu'on les présente dans la section 4.3, comme dans AVBP, mais certains solveurs sont capables de traiter des éléments totalement quelconques (comme le code CEDRE de l'ONERA).

L'intérêt des maillages hybrides est la possibilité d'utiliser les avantages de chacun des éléments. Les éléments hexaédriques permettent pour un nombre de noeuds donné de diminuer le nombre de cellules (dans un hexaèdre, donc 8 noeuds, on peut avoir 5 ou 6 tétraèdres). Certaines situations nécessitent l'emploi des hexaèdres comme la résolution d'une couche limite : Auffray [14] a mis en évidence la supériorité très nette des quadrangles / hexaèdres devant les triangles / tétraèdres (très étirés et irréguliers dans de tels cas). En revanche, les tétraèdres permettent de raffiner / déraffiner beaucoup plus facilement le maillage. Par ailleurs, les tétraèdres permettent de réaliser des maillages relativement isotropes, à l'inverse des hexaèdres, ce qui peut s'avérer être un avantage non négligeable sauf lorsqu'on sait, à l'avance, qu'une direction est privilégiée dans l'écoulement. Une conséquence est que les tétraèdres souffrent beaucoup moins des *wiggles* que les hexaèdres.

3.1.2 Méthodes numériques pour les LES dans les géométries simples

La précision est le maître mot qui doit caractériser les schémas numériques utilisés dans ce type de calcul. En effet, pour simuler les phénomènes très fins se produisant au niveau des flammes, la discrétisation doit interagir le moins possible avec la physique. Ainsi, la dissipation numérique doit être la plus faible possible, voire nulle, pour ne pas fausser les transferts d'énergie entre les différentes échelles de la turbulence résolue et la dissipation visqueuse introduite par le modèle de viscosité turbulente. Par ailleurs, l'erreur de dispersion due à la discrétisation - qui peut modifier de façon dramatique la vitesse de propagation des ondes (de quelque nature qu'elles soient) - doit être minimale et le domaine de longueur d'onde pour lequel cette erreur est négligeable, voire nulle, doit être le plus large possible. Les schémas employés sont généralement basés sur la méthode des différences finies (ou une formulation des volumes finis très proche) sur des maillages structurés, la plupart du temps très réguliers. On va évoquer deux méthodes couramment employées pour réaliser des approximations très précises des dérivées spatiales.

Schémas compacts

Les schémas compacts [125], appelés aussi schémas Hermitiens ou schémas de Padé, ont des propriétés spectrales (erreur de dispersion) bien supérieures aux méthodes aux différences classiques d'ordre de convergence similaire. Ils sont implicites en espace et leur formulation générale est la suivante [221] :

$$\sum_{k=-N_l}^{N_r} a_k \left. \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right|_{j+k} = \frac{1}{h^n} \sum_{k=-M_l}^{M_r} b_k u_{j+k} \quad (3.1)$$

où j est le noeud où est calculée la dérivée n -ième par rapport à x , $\frac{\partial^n u}{\partial x^n}$, d'un scalaire u est calculée. h est le pas d'espace et N_l et M_l (*resp.* N_r et M_r) est le nombre de points utilisés à gauche (*resp.* à droite) de j . La formule (3.1) est uniquement valable pour des maillages uniformes (pas d'espace constant) mais des développements ont été aussi réalisés pour des maillages non-uniformes. Pour la formulation classique des dérivées suivant la méthode des différences finies, seul le coefficient a_0 est différent de zéro dans le membre de gauche. La formule précédente s'écrit sous forme matricielle :

$$[A] \left\{ \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right\} = [B] \{u\} \quad (3.2)$$

et les matrices $[A]$ et $[B]$ sont construites avec les coefficients a_k et b_k de l'équation (3.1). Ces matrices sont donc creuses (diagonales, tri-, penta-diagonales...etc) avec des propriétés souvent avantageuses (symétriques ou antisymétriques par exemple). Un des points importants demeure la nature implicite de l'opérateur puisque pour exprimer la dérivée n -ième en j , il faut inverser $[A]$. Toutefois, le coût de calcul supplémentaire est souvent largement compensé par les performances des schémas obtenus.

De nombreuses équipes de recherche utilisant ce type de schémas et plusieurs applications ont démontré et confirmé leurs qualités [174, 174, 252, 56, 221], en particulier pour réaliser des DNS. En règle générale, ces schémas sont associés à des intégrations temporelles explicites de type Runge-Kutta ou Adams-Bashforth ² [221].

On s'intéresse plus particulièrement au cas $n = 1$. La majorité du temps, les schémas compacts utilisés pour exprimer les dérivées premières (terme de convection) sont centrés afin d'être non dissipatifs. Bien qu'il ait été mis en évidence par Mittal et Moin [144] qu'un schéma amont ne devrait pas être utilisé dans le cadre d'une LES, à cause de la viscosité numérique introduite par le décentrement, Sengupta [221] indique qu'un schéma compact amont d'ordre élevé permet d'obtenir d'excellents résultats (l'erreur de dispersion est encore plus faible, la résolution spectrale est donc accrue) et d'améliorer la robustesse du schéma de façon sensible, en limitant les effets d'*aliasing* qu'on évoquera chapitre 5 (seules les très hautes fréquences, généralement d'origine numérique, sont dissipées ; ainsi la dissipation numérique ne semble pas avoir un effet très sensible sur la physique) sans pour autant nuire au transfert d'énergie turbulente.

²D'après Sengupta [221], l'utilisation d'une intégration temporelle de type Adams-Bashforth est à proscrire en DNS - et pourtant très utilisée - car elle peut dissiper les instabilités physiques et souffre d'une erreur de dispersion non négligeable, du fait de la forme particulière de son coefficient d'amplification.

Schémas totalement conservatifs

Cette appellation fait référence aux schémas numériques centrés qui conservent discrètement non seulement la grandeur u transportée, mais aussi son carré u^2 . Ils ont été développés en suivant les principes de la méthode de l'énergie [114]. Prenons un exemple très simple pour illustrer l'intérêt de cette caractéristique. En simplifiant au maximum l'opérateur de convection des équations de Navier-Stokes, on obtient l'équation de convection linéaire monodimensionnelle homogène et à coefficient constant :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.3)$$

en multipliant par u , on obtient :

$$u \frac{\partial u}{\partial t} + cu \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial u^2}{\partial t} + \frac{c}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} = 0 \quad (3.5)$$

Cela signifie que lorsqu'une grandeur est transportée et conservée, son carré (l'énergie) l'est aussi. Ceci est vrai pour n'importe quelle dimension. De la même manière, on peut montrer [148, 94] que l'énergie cinétique doit être conservée (lorsque la densité est constante et sans compter les termes de dissipation visqueuse physique). L'idée est donc de développer des schémas permettant de conserver les carrés des grandeurs qu'ils transportent. Si on note A l'opérateur discret tel que :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_j \simeq Au_j$$

alors on veut :

$$u_j Au_j = \frac{1}{2} A(u_j)^2$$

ce que majorité des schémas ne vérifie pas !

Un schéma aux différences centrées d'ordre 2 a cette propriété. Cependant, comme l'indiquent Morinishi et al [148], sa précision demeure insuffisante et une LES nécessite alors un nombre de points considérables, donc un coût de calcul parfois prohibitif. Pour remédier à ce problème, ils ont construit, sur maillages décalés (ou *staggered* - pression et vitesses ne sont pas stockés aux mêmes endroits, selon les idées de Harlow et Welch [96], figure 3.3), des schémas d'ordre élevé (de n'importe quel ordre en fait !) ayant ces propriétés en utilisant des combinaisons entre des opérateurs d'interpolation (qu'on écrit pour un maillage monodimensionnel) :

$$\bar{u}^{nx}|_x = \frac{u(x + nh/2) + u(x - nh/2)}{2} \quad (3.6)$$

et des opérateurs de différenciation :

$$\left. \frac{\delta_n u}{\delta_n x} \right|_x = \frac{u(x + nh/2) - u(x - nh/2)}{nh} \quad (3.7)$$

Ham [94] a généralisé ce travail pour des maillages non réguliers et Morinishi et al [149] pour des maillages cylindriques. Ces schémas sont donc non dissipatifs et ne perturbent pas les transferts d'énergie liés à la turbulence. Le caractère conservatif et non dissipatif doit aussi être assuré par

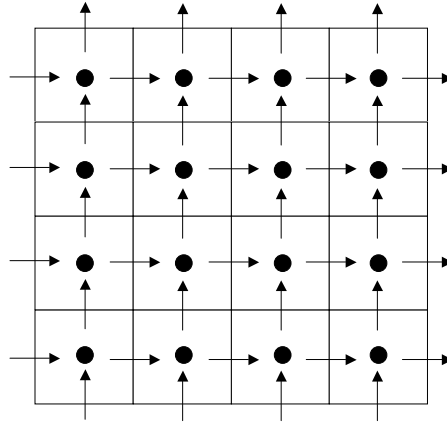


FIG. 3.3 - Exemple d'un maillage décalé. Pression, densité et scalaires sont stockés aux centres des volumes de contrôle (indiqués par ●). Ici, les vitesses sont stockées aux faces et indiquées par les flèches $\rightarrow$ et $\uparrow$.

l'avancement temporel. Ainsi, ces opérateurs spatiaux sont le plus souvent associés au schéma implicite Crank-Nicolson, qui présente cette particularité.

L'autre intérêt (et c'est peut-être le plus important !) est la stabilité linéaire et non linéaire de ces schémas. Le carré d'une grandeur représente l'énergie associée et permet d'écrire sa norme L^2 ³. L'énergie étant transportée correctement et restant bornée implique que la norme L^2 est aussi bornée ce qui assure la stabilité des calculs [172].

La principale application de ces schémas est l'étude des écoulements turbulents incompressibles, du fait de leur capacité à conserver l'énergie cinétique (qui est l'énergie la plus représentative de l'écoulement dans ce cas). Toutefois, Pierce [172] et Wall [257] ont aussi utilisé ces schémas avec succès pour la simulation d'écoulements compressibles (où l'énergie la plus représentative est l'énergie totale, qui est une grandeur transportée) et la combustion turbulente.

Quel que soit le type d'écoulement étudié, ces schémas privilégient donc clairement l'aspect 'non-dissipation' au détriment de la 'non-dispersion', partant de l'argument classique (voir chapitre 9 - [233]) que le bilan d'énergie cinétique turbulente moyenne n'est pas modifié par la dispersion. Il faut noter, toutefois, que l'utilisation de maillages décalés a quelques vertus (pour certaines variables) en terme de dispersion car ils améliorent considérablement le nombre d'onde modifié du schéma numérique considéré [172].

Conclusions

Il existe bien évidemment d'autres alternatives, à commencer par les méthodes spectrales ou pseudo-spectrales [254, 27], mais les restrictions (domaines périodiques par exemple) sont importantes et ces méthodes, très coûteuses, sont plutôt destinées à la DNS.

³La définition est rappelée chapitre 5 et correspond à la somme sur tous les noeuds de l'énergie pondérée par le volume de contrôle associé.

Les schémas présentés ici ne sont utilisables (tels quels) que sur des maillages structurés où il est aisé d'utiliser des points qui ne sont pas directement liés au noeud sur lequel l'opérateur est calculé. Clairement, sur maillages non-structurés, la construction de ces schémas est très lourde et surtout prohibitive d'un point de vue coût de calcul. D'autres alternatives doivent donc être étudiées.

3.1.3 Méthodes numériques pour les LES dans les géométries complexes

La précision reste un critère important pour ces simulations. Toutefois, la robustesse devient cruciale car les sources d'instabilités numériques sont beaucoup plus nombreuses : les maillages sont non-structurés (ou structurés par blocs), avec des tailles de cellules très variables : les parois des chambres de combustion peuvent avoir des formes géométriques complexes (coins) et il peut y avoir une grande quantité de conditions d'entrée/sortie [95]. Les méthodes des différences finies sont remplacées par les volumes finis ou les éléments finis.

Le type de schéma le plus classique utilisé pour ces LES est le schéma volumes finis aux différences centrées, soit *centrés cellules*, soit *centrés sommets* (qu'on présente plus dans les détails au chapitre suivant), associé à des opérateurs de viscosité artificielle pour assurer la stabilité en présence de forts gradients. Il s'agit, en effet, de l'option la plus simple à mettre en oeuvre. Les schémas temporels sont généralement des méthodes Runge-Kutta explicites (avec au moins 3 étapes pour des raisons de stabilité) [214] ou Crank-Nicolson. On peut trouver aussi des exemples d'applications avec le schéma Lax-Wendroff [214, 116] et des dérivés [208].

Les différences centrées classiques, associées à ces avancements temporels, sont peu (ou pas du tout) dissipatives, mais leur précision peut dégénérer rapidement, dès que le maillage devient très irrégulier (ordre 2 à 1, voire moins !) et les erreurs de dispersion associées deviennent rapidement trop importantes. D'autres méthodes sont désormais assez répandues. Elles sont plus précises et plus robustes. On en présente certaines :

Schémas volumes finis *totale*ment conservatifs

Il s'agit de l'adaptation des schémas présentés pour les LES en géométries simples. Le but est toujours de construire des opérateurs permettant de conserver le carré des grandeurs considérées. Ces opérateurs, ainsi que des applications, sont présentés par Mahesh et al [135, 169] et Ham et al [93, 95]. Ils ont fait l'objet d'une étude approfondie pendant cette thèse, qu'on ne présentera toutefois pas dans ce manuscrit (séjour d'un mois au CTR de l'Université de Stanford, sous la tutelle de Vincent Moureau, alors post-doctorant). Leur intérêt est le même que pour les LES en géométries simples, c'est-à-dire à la fois respecter une propriété mathématique importante et pourtant souvent omise, qu'est la conservation discrète de l'énergie (fidélité par rapport à la physique), ainsi qu'assurer la stabilité linéaire et non-linéaire du calcul, sans avoir à ajouter de viscosité artificielle (robustesse) [94, 93, 95, 99]. La discrétisation temporelle souvent associée est le schéma Crank-Nicolson, ce qui nécessite quelques ajustements pour la simulation d'écoulements compressibles à faible Mach [172, 257] (solveur basé sur la pression) et évite le préconditionnement de la matrice à inverser pour résoudre le problème, comme c'est le cas en général [248] avec les solveurs basés sur la densité.

Schémas volumes finis amont d'ordre élevé

L'INRIA [1, 25, 113] a développé des schémas volumes finis amont de type MUSCL à très faible dissipation (dissipation d'ordre 4 voire d'ordre 6 sur maillages réguliers). L'avantage est de cumuler des qualités propres aux schémas décentrés (erreur de dispersion faible et robustesse), tout en assurant un minimum de dissipation numérique, évitant ainsi d'interagir avec le modèle de turbulence. Ces schémas, construits en suivant les principes de la méthode de Galerkin (ayant donc des affinités avec les éléments finis lorsque le maillage est composé de simplexes), sont basés sur une formulation assez courante *centrés sommets* avec une connectivité aux arêtes, ce qui augmente considérablement leur intérêt.

Schémas à résidus distribués

Comme on le verra au chapitre suivant, cette catégorie de schémas englobe les volumes finis de type *cell-vertex* et tout schéma pouvant être formulé comme une méthode des éléments finis de *Petrov-Galerkin*⁴. Les applications de LES de ce type de schémas ont été principalement réalisées par le CERFACS [161, 181, 218, 116] mais on peut citer aussi les résultats obtenus par l'équipe de Fuchs de l'université de Lund [28, 29], utilisant, entre autre, le schéma amont LDA pour simuler des écoulements autour d'obstacles et obtenant avec d'excellents résultats.

Par ailleurs, une extension des schémas *cell-vertex* sont les méthodes éléments finis de type Taylor-Galerkin, comme on le verra section 4.6. Ces schémas numériques ont démontré tout leur potentiel pour réaliser des LES, en particulier en géométrie complexe [218, 220].

3.1.4 Cas particuliers : transport de scalaires et écoulements compressibles à nombres de Mach élevés

Jusqu'à présent, on a parlé des schémas numériques permettant la simulation d'écoulements turbulents. La principale qualité recherchée dans la discrétisation est sa capacité à interagir le moins possible avec les vrais phénomènes physiques, en particulier à apporter un minimum de dissipation numérique. Dans le cas d'écoulements réactifs, on est, en outre, amené à transporter des scalaires (passifs ou non), ce qui implique de respecter certaines propriétés supplémentaires et notamment, le fait que ces grandeurs sont le plus souvent bornées. De la même manière, dans le cas d'écoulements fortement compressibles (présence de chocs) ou d'écoulements diphasiques modélisés par une approche Eulérienne [109], l'emploi de solveurs de Riemann (exacts [90] ou approchés [196]) peut s'avérer nécessaire.

Dans le cas de géométries simples et de maillages structurés, on peut faire appel à différentes techniques :

- Schémas centrés combinés à des détecteurs de chocs et des viscosités d'ordre élevé [51, 73],
- Schémas amont (ou au moins biaisés amont) d'ordre élevé et de préférence ayant les propriétés de monotonie adéquates (QUICK [68], BQUICK [98], schémas TVD [97] ou encore ENO/WENO [223]).
- Schémas FCT d'ordre élevé [165]

On notera enfin que l'ajout de viscosité numérique dans les équations de transport de scalaires, impliqué par l'utilisation de ces stratégies, a moins d'impact sur l'interaction avec la turbulence car les transferts d'énergie ne sont plus non-linéaires [172, 98].

⁴voir section 4.5. Ceci est valable uniquement pour des simplexes.

Dans le cas de géométries complexes, le problème devient particulièrement ardu car les schémas précédemment cités emploient des *stencils*⁵ parfois larges, et adapter ces procédures à des maillages non structurés peut s'avérer très coûteux et complexe [3], bien que des procédures existent. Le plus souvent, les schémas centrés, décrits précédemment, sont combinés à divers opérateurs de viscosité artificielle afin de limiter un maximum les oscillations au niveau des forts gradients. Néanmoins, aucune garantie *a priori* n'est fournie par cette méthode et demande souvent à l'utilisateur de nombreuses tentatives avant d'obtenir un calcul stable et suffisamment précis. A ce titre, les schémas volumes finis amonts d'ordre élevé avec emploi de limiteurs adéquates, les méthodes Galerkin discontinues [42] ou les schémas à distribution de résidus amont peuvent s'avérer être des alternatives très intéressantes pour les géométries complexes.

3.1.5 Autres méthodes numériques

Que ce soit pour réaliser des LES en géométries simples ou complexes, il existe des alternatives démontrant un grand potentiel et basées sur des approches de la LES très différentes. On en présente brièvement deux en évoquant les schémas numériques correspondants.

Schémas à limiteurs de flux ou FCT pour la méthode MILES

Ici, l'approche traditionnelle LES qui consiste à modéliser le tenseur des contraintes de sous-maille est abandonnée. La méthode consiste à utiliser des schémas dissipant les petites échelles (approches décentrées MUSCL, PPM... avec limiteurs de flux ou encore méthodes avec correction de flux (FCT), le but étant d'assurer la monotonie spatiale et locale de la solution) de façon à ne pas avoir besoin d'utiliser de modèle de sous-maille [77, 78]. Un des avantages est d'éviter les erreurs de commutation (entre les opérateurs différentiels et le filtre) qui existent dans les méthodes classiques [250, 77, 78]. Les résultats obtenus démontrent clairement la capacité de la formulation MILES à produire de très bons résultats, ce qui en fait une alternative intéressante aux LES classiques.

Méthodes variationnelles multi-échelles

La VMM (*Variational Multiscale Method*) provient du constat que la méthode de Galerkin n'est pas robuste lorsqu'utilisée pour résoudre des problèmes dans lesquels apparaissent des phénomènes d'échelles très différentes. Le principe consiste alors à décomposer la solution en une partie 'grandes échelles' (*coarse scales*) résolue numériquement (et liée au maillage) et une partie 'échelles fines' (*fine scales*) résolue analytiquement (le maillage étant trop grossier). Comme le soulignent Calo [24] et Hughes (chapitre 2 -[233]), ce cadre se prête très bien à la LES. Par ailleurs, la VMM présente des liens très étroits avec les méthodes éléments finis stabilisés classiques, introduites par Brooks et Hughes [9] (avec le schéma SUPG) puis C.Johnson [108] en particulier, et destinées aux simulations de type RANS.

⁵Voir chapitre suivant pour une définition

3.2 Travail de la partie II

Dans la partie II de cette thèse, on décrit tout d'abord en détail les schémas numériques utilisés dans AVBP (discrétisations spatiales et centrées), ainsi que ceux implantés au cours de cette thèse, pour réaliser certains tests (chapitre 4). Le chapitre 5 présente différentes analyses, pratiques et théoriques, sur des domaines périodiques, permettant de caractériser les performances de ces schémas et de donner une idée des erreurs typiques qu'ils introduisent dans les calculs. Le chapitre 6 met en avant l'influence que peuvent avoir les bords du domaine de calcul et à quel point ils peuvent dégrader la solution et les performances des schémas. Enfin le chapitre 7 montre une application des méthodes présentées dans les deux premières parties sur une géométrie réelle.

3.3 Tableau récapitulatif des schémas étudiés pendant cette thèse

Le tableau 3.3 indique tous les schémas testés et/ou codés pendant cette thèse, ainsi que les acronymes auxquels on les associe.

Acronyme	Nom complet du schéma	Existant dans AVBP	Testé / codé dans AVBP	Famille -Réfs	Erreur locale en temps	Erreur locale en espace	Section dans cette thèse
DC ou CV	<i>Différences centrées</i>	OUI form. <i>cell-vertex</i>	testé étude prat. et théo.	VF <i>cell-vertex</i> EF Petrov Galerkin	-	$\mathcal{O}(h^2)$	4.4 - 5.2 - 5.4
LW	<i>Lax-Wendroff</i>	OUI form. <i>cell-vertex</i>	testé étude prat. et théo.	VF <i>cell-vertex</i> EF-Petrov Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	4.4 - 5.2 - 5.4 - 7.3
LW-EF	<i>Lax-Wendroff éléments finis</i>	OUI form. EF	testé étude prat. et théo.	EF-Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	5.4
Galerkin	<i>Galerkin éléments finis</i>	OUI form. EF	testé étude prat. et théo.	EF-Galerkin	-	$\mathcal{O}(h^4)$	4.5 - 5.4
ETG	<i>Euler-Taylor-Galerkin</i>	NON	non testé dans AVBP étude théo.	Taylor-Galerkin EF-G ou EF-PG	$\mathcal{O}(\Delta t^3)$	$\mathcal{O}(h^3)$	4.6 - 5.2 - 5.4
TTG3	<i>Two step-Taylor-Galerkin</i>	OUI et NON form. EF	testé / codé étude théo.	Taylor-Galerkin EF-Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^3)$	$\mathcal{O}(h^3)$	4.6 - 5.2
TTG4A	<i>Two step-Taylor-Galerkin '4A'</i>	OUI form. EF	testé / codé étude prat. et théo.	Taylor-Galerkin EF-Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^3)$	$\mathcal{O}(h^3)$	4.6 - 5.2 - 5.2 - 7.3
TTG4B	<i>Two step-Taylor-Galerkin '4B'</i>	NON	testé / codé	Taylor-Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^3)$	$\mathcal{O}(h^3)$	4.6
TTGC	<i>Two step-Taylor-Galerkin 'C'</i>	form. EF OUI form. EF	étude théo. testé étude prat. et théo.	EF-Galerkin Taylor-Galerkin EF-Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^3)$	$\mathcal{O}(h^3)$	4.6 - 5.2 - 5.2 - 7.3
N	<i>Narrow</i>	NON	testé / codé étude prat.	Résidu distribué	-	$\mathcal{O}(h)$	4.5 - 5.4
LDA	<i>Low Diffusion A</i>	NON	testé / codé étude prat.	Résidu distribué	-	$\mathcal{O}(h) - \mathcal{O}(h^2)$	4.5 - 5.4
PSI	<i>Positive Streamwise Invariant</i>	NON	testé / codé	Résidu distribué	-	$\mathcal{O}(h) - \mathcal{O}(h^2)$	4.5 - 5.4
LW scalaire	<i>Lax-Wendroff form. RD</i>	NON	testé / codé étude théo. et prat.	Résidu distribué	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	4.5 - 5.2 - 5.4
PSI-LW FCT	<i>PSI-Lax-Wendroff Flux-Corrected Transport</i>	NON	testé / codé étude prat.	Résidu distribué	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	4.5 - 5.4

Chapitre 4

Méthodes numériques pour la LES - le code AVBP

4.1 Introduction

4.1.1 Le code AVBP

Le code AVBP a été écrit à l'origine par l'OUCL (Oxford University Computing Laboratory) et le CERFACS en 1993. Il est désormais la propriété du CERFACS et de l'IFP qui le maintiennent et le développent conjointement. Le code a été créé dans le but d'avoir à disposition un solveur des équations de Navier-Stokes capable de supporter des maillages non structurés et hybrides (type de cellule arbitraire) afin d'assurer à l'utilisateur une flexibilité maximale lors de la discrétisation du domaine de calcul. La conception d'AVBP repose sur l'idée de construire une librairie de routines pour obtenir une modularité totale [204, 203, 215] et faciliter le développement et le codage de nouveaux modèles physiques. Il faut de plus noter qu'AVBP a été écrit, dès le départ, pour être utilisé sur des calculateurs parallèles (librairie COUPL, depuis remplacée par MPL) ce qui explique ses performances actuelles sur les super-calculateurs [204, 203, 215].

Les méthodes numériques du code AVBP ont été originellement implantées par M.Rudgyard et T.Schönfeld, en suivant les travaux réalisés, en particulier à Oxford [166, 199, 134, 55, 54], sur les méthodes volumes finis de type *cell-vertex*, qu'on présente dans la suite de ce chapitre.

4.1.2 Méthodes *cell-vertex* et ses concurrentes

La méthode des volumes finis permet de réaliser les discrétisations des lois de conservation décrites dans la partie I de cette thèse, dans leur formulation intégrale (que l'on écrit sans terme source pour le moment) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{U} dV + \oint_{\partial\Omega} \vec{\mathcal{F}} \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (4.1)$$

Dans le cas des équations d'Euler (ou de Navier-Stokes) pour les fluides compressibles, trois for-

mulations différentes (et quelques variantes) sont principalement utilisées. Les trois méthodes sont les suivantes :

- *cell-centre* (ou *-centred*) ou en français "centrée cellules",
- *vertex-centred* (ou parfois *node-based*) ou "centrée sommets",
- *cell-vertex* traduite parfois par "cellules et sommets".

Quelle que soit la méthode, la première étape reste identique. Il s'agit tout d'abord de discrétiser le domaine de calcul en un ensemble conforme de polygones (ou de polyèdres, selon la dimension) pour former le maillage :

$$\Omega = \bigcup_{K_e \in \mathcal{T}_h} K_e \quad (4.2)$$

Il faut noter qu'une confusion est souvent faite, comme le rappelle Schönfeld dans sa thèse de doctorat (page 31) [213] :

The terms "structured" and "unstructured" merely denote the data type employed for the description of the node connectivity, but do not necessarily contain information about the shape of the grid cells!

Cela signifie qu'un maillage composé d'éléments typiques des grilles structurées (carrés, cubes...) n'est pas forcément lui-même structuré. Le code AVBP ne gère **que les maillages non structurés et hybrides**.

Une fois le maillage disponible, l'équation (4.1) est discrétisée en espace et on écrit en général :

$$\boxed{\frac{d}{dt}(\mathbf{U}_e V_e) + \sum_{f|f \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_f \cdot \vec{S}_f = \mathbf{0}} \quad (4.3)$$

où V_e est la mesure du volume de contrôle K_e , $\mathbf{U}_e$ peut être vue comme une moyenne de la quantité $\mathbf{U}$ dans K_e , $\vec{\mathcal{F}}_f$ est le flux "numérique" (approximation du flux réel $\vec{\mathcal{F}}$) de $\mathbf{U}$ à travers le côté (ou la face) f et $\vec{S}_f$ la normale (pondérée par la longueur ou la surface de f) extérieure à K_e , associée à f . Il est à noter que la méthode des volumes finis, pour être *conservative*, doit assurer que le flux entrant par la face d'une cellule est égal au flux sortant par la face correspondante de la cellule adjacente. Ainsi, la variation temporelle de la variable $\mathbf{U}$ est égale aux flux de cette variable à travers les bords du domaine Ω . De plus, la consistance selon la méthode des volumes est définie par :

$$\vec{\mathcal{F}}_f(\mathbf{U}, \mathbf{U}, \dots, \mathbf{U}) = \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) \quad (4.4)$$

Dans la discussion qui suit, on va s'intéresser uniquement au terme spatial (le second dans l'équation (4.3)) pour lequel les différences entre les méthodologies sont les plus sensibles.

Méthode *cell-centre*

Cette formulation est la plus classique des trois et a été décrite en détails dans [195, 107, 106, 100, 200, 239, 55]. Les noeuds du maillage sont uniquement utilisés pour définir les délimitations des différents volumes de contrôle. Les lois de conservations sont appliquées dans les cellules du maillage et les variables sont stockées aux centres de ces éléments (figure (4.1)).

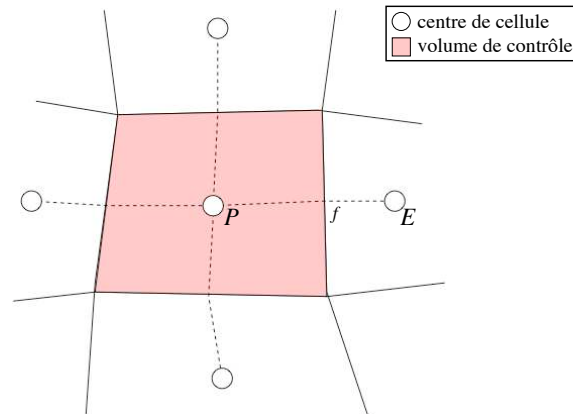


FIG. 4.1 - Maillage utilisé avec la méthode *cell-centre*. Les volumes de contrôle (coloriés) sont définis par les cellules, les variables stockées au centre de celles-ci.

Pour un schéma centré, en règle générale, le flux $\vec{F}_f$ est défini (en 2D) de la manière suivante : $\vec{F}_f = \frac{1}{2}(\vec{F}(\mathbf{U}_P) + \vec{F}(\mathbf{U}_E))$. Il existe bien d'autres manières de définir le flux, dans le cadre des schémas décentrés (utilisation de séparateurs de flux [232], des solveurs approximatifs ou non de Godunov [196]) ou en introduisant une viscosité artificielle [107]). Sur maillage régulier, cette approximation permet d'obtenir une précision à l'ordre 2, mais elle dégénère dès que la taille de maille varie [239]. Morton et Paisley [151] ont montré que pour obtenir un ordre de convergence de 1 pour les flux convectifs, la variation de taille de mailles successives doit être en $1 + \mathcal{O}(h)$ et pour l'ordre 2 en $1 + \mathcal{O}(h^2)$, où h est une taille de maille caractéristique (soit $h = \text{diam}(K_e)$). Dans les inconvénients, ils ont aussi répertorié l'apparition de différents types d'oscillations numériques (ou *wiggles*) en damier. Enfin, on ajoutera que cette méthode est souvent vue comme une méthode des différences finies, appliquée à la formulation intégrale des lois de conservation [199].

Méthode *vertex-centred*

Cette formulation est assez proche de la précédente et la littérature la concernant est très riche [17, 139, 31, 32, 255]. Là encore, les variables sont stockées aux centres des volumes de contrôle. Ici néanmoins, les variables sont définies aux noeuds. Les lois de conservation ne sont donc plus appliquées dans les cellules primales du maillage, comme dans le cas précédent, mais dans des cellules dites *duals* dont la définition peut varier (voir Barth [17, 16]). Une définition assez classique, appelée *dual médiane*, consiste à relier les centres des arêtes avec les centres des cellules (en 2D) comme sur la figure (4.2).

La définition du flux à la face se fait souvent de la même manière que pour la méthode *cell-centre*. De ce fait, on peut voir cette méthode comme très proche des différences finies et, *a priori*, sa précision peut dégénérer rapidement avec des maillages distordus. Par rapport à la méthode *cell-centre*, la formulation *vertex-centred* présente l'inconvénient d'avoir à définir deux maillages. Cependant, de nombreuses démonstrations ont montré le lien qui existe avec la méthode de Galerkin (donc les éléments finis) sur des maillages constitués d'éléments P1 (triangles ou tétraèdres), ce qui présente un avantage certain, d'un point de vue rigueur et précision [72, 139, 16, 255]. Par ailleurs, selon la métrique choisie (définition des normales, volumes de contrôle...), on peut même retrouver une discrétisation très proche de la méthode *cell-vertex* [54].

L'INRIA a construit de nombreux schémas numériques suivant une formulation *vertex-centred* à partir

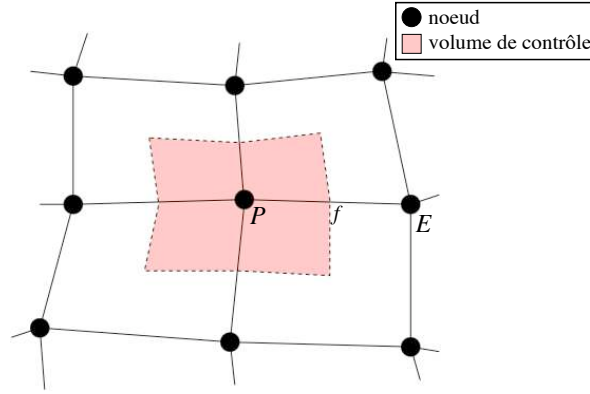


FIG. 4.2 - Maillage utilisé avec une méthode vertex-centred . Ici les volumes de contrôle (coloriés) sont définis par les cellules duales médianes, les variables sont stockées aux noeuds.

d'une connectivité basée aux arêtes [31, 32]. Certains en particulier sont d'ordre élevé et à dissipation faible [1] et applicables à la LES [25, 113]. Maintenir une précision d'ordre supérieur ou égal à deux demande, néanmoins, l'élargissement du stencil, ce qui augmente inévitablement le temps de calcul.

Méthode cell-vertex

La dernière méthode est décrite plus en détail dans la suite de ce chapitre puisqu'il s'agit de la méthode adoptée dans AVBP. Elle a été introduite par R-H.Ni [158], modifiée par Hall [91] et étudiée par divers auteurs et en particulier par l'équipe de K.W. Morton [198, 150, 187, 200, 134, 239, 201, 202, 34]. Sur des maillages constitués de rectangles, elle correspond au schéma boîte (*box scheme*) de Keller. Elle se distingue des deux autres par le fait que les variables ne sont plus stockées au centre des volumes de contrôle (figure (4.3)). Les bilans des lois de conservation sont appliqués dans les cellules du maillage primal, alors que les solutions sont définies aux noeuds. Ainsi le flux à l'arête f est défini (en 2D) généralement de la manière suivante :

$$\vec{F}_f = \vec{F}\left(\frac{\mathbf{U}_A + \mathbf{U}_B}{2}\right) = \frac{1}{2}(\vec{F}(\mathbf{U}_A) + \vec{F}(\mathbf{U}_B)),$$

ce qui revient à appliquer la méthode des trapèzes pour le calcul de l'intégrale de la partie spatiale de l'équation (4.1) (et assumer que les flux varient linéairement le long des arêtes). Ici le flux a donc été intégré le long des arêtes, contrairement à ce qui est fait avec les méthodes précédemment décrites (on calcule un flux avec une moyenne qui *traverse* la surface d'intégration). Ainsi, la méthode *cell-vertex* présente une forte affinité avec les éléments finis [150, 153]. De nombreuses études concernant la précision de cette méthode ont été réalisées [202]. On citera notamment celles de Roe [198], de Morton et Paisley [150] et de Swanson et Radespiel [239]. Des études beaucoup plus rigoureuses, d'un point de vue mathématique, ont été aussi réalisées par Morton, Stynes et Süli [237, 153]. Ils ont démontré que la méthode *cell-vertex* est plus précise que les deux autres et surtout, bien plus robuste aux distorsions de maillage. En effet, pour les dérivées d'ordre 1, elle converge au second ordre tant que le rapport de taille de mailles successives est en $1 + \mathcal{O}(h)$ et qu'il suffit que le rapport soit de $1 + \mathcal{O}(1)$ pour assurer l'ordre 1. Une autre manière d'exprimer un critère pour le second ordre est que : $\vec{x}_A - \vec{x}_B + \vec{x}_C - \vec{x}_D = \mathcal{O}(h^2)$, où $\vec{x}$ sont les coordonnées des sommets A, B, C et D d'un quadrilatère.

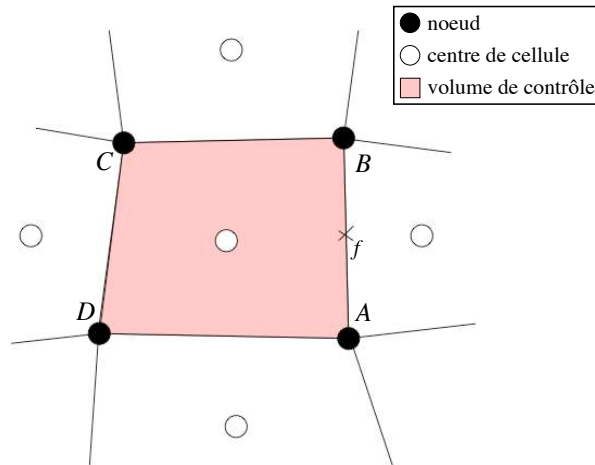


FIG. 4.3 - Maillage utilisé avec la méthode *cell-vertex*. Les volumes de contrôle (coloriés) sont définis par les cellules et les variables sont stockées aux noeuds.

Un des problèmes de la méthode *cell-vertex* reste que le nombre d'équations de bilan est différent du nombre d'inconnues, ce qui nécessite d'écrire des équations nodales lors de la mise à jour temporelle [201, 55], ce qui peut s'avérer relativement coûteux. Par ailleurs, au même titre que les autres méthodes, la formulation *cell-vertex* souffre aussi de la présence de *wiggles* (oscillations en damiers), ce qui, là aussi, implique l'utilisation de viscosité artificielle, comme on le verra par la suite.

4.2 Nomenclature

Ce chapitre va faire appel à de très nombreuses notations. Pour assurer la clarté de la lecture, on va présenter les conventions adoptées principalement dans ce chapitre.

Variables

Il existe plusieurs types de vecteurs appartenant à différents espaces vectoriels.

- Le nombre de dimensions du domaine de calcul Ω est noté d , les vecteurs de $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ seront indiqués avec une flèche. Ainsi le vecteur position s'écrit $\vec{x}$. Les matrices sont soulignées deux fois.
- Les équations résolues (comme Navier-Stokes) sont écrites sous forme de système à m équations. Les vecteurs contenant la solution du système appartiennent ainsi à $\mathbb{R}^m$ et seront marqués en gras. On prend l'exemple du vecteur contenant les variables conservatives : $\mathbf{U}$. Les matrices correspondantes seront notées comme les vecteurs et soulignées.
- Une fois la notion de discrétisation introduite, de nouveaux objets apparaissent. Les vecteurs contenant toutes les valeurs de la solution aux N_h noeuds du maillage sont écrits entre accolades. Pour la résolution d'une équation seule, ces vecteurs appartiennent à $\mathbb{R}^{N_h}$. Lorsqu'il s'agit d'un système,

les vecteurs sont dans $\mathbb{R}^{m \times N_h}$. Les matrices correspondantes appartiennent soit à $\mathcal{M}_{N_h}(\mathbb{R})$, soit à $\mathcal{M}_{m \times N_h}(\mathbb{R})$ pour un système. On les note entre crochets. La matrice de masse s'écrit par exemple : $[\mathcal{M}]$.

Indices - Exposants

Plusieurs types d'indices ou d'exposants peuvent apparaître dans les définitions des méthodes qu'on décrit dans ce chapitre. D'une manière générale, les indices sont liés à la discrétisation spatiale et les exposants à la discrétisation temporelle. Il arrive néanmoins qu'un exposant soit utilisé pour indiquer un numéro de cellule.

Il y a, en outre, plusieurs types de sommations : globales (sur l'ensemble des éléments ou des noeuds) ou locales (sur les sommets d'une cellule).

- Lorsqu'on travaille avec les éléments ou cellules, ceux-ci seront désignés par l'indice e avec $e \in \{1, \dots, N_K\}$. Une somme sur l'ensemble des cellules du maillage sera notée de façon synthétique : $\sum_{e \in \mathcal{T}_h}$ signifiant en réalité : $\sum_{e|K_e \in \mathcal{T}_h}$.
- Pour la numérotation locale des sommets d'une cellule, on utilisera les indices k ou l avec $k, l \in \{1, \dots, n_v^e\}$. La sommation sur les noeuds k d'une cellule sera donc notée : $\sum_{k \in K_e}$ avec pour signification $\sum_{k|k \in K_e}$.
- La sommation sur les faces notées avec l'indice f où $f \in \{1, \dots, N_f\}$, telle que les faces sont liées à un sommet k est écrite : $\sum_{f \ni k}$ et signifie : $\sum_{f|k \in f}$.
- Pour désigner la numérotation globale des noeuds, on utilisera l'indice j ¹. On a donc $j \in \{1, \dots, N_h\}$.
La sommation des contributions des cellules adjacentes à un noeud j (opération *scatter*, décrite section 4.3) s'écrit : $\sum_{e \in \mathcal{D}_j}$ et signifie : $\sum_{e|j \in K_e}$.
 $\mathcal{D}_j = \bigcup_{e|j \in K_e} K_e$ désigne l'ensemble des éléments contenant le noeud j .

4.3 Equations résolues et calcul des métriques

4.3.1 Equations sous forme compacte

Comme on l'a évoqué dans la partie I, la formulation différentielle des équations de Navier-Stokes, des équations décrivant la phase dispersée ou encore des équations de convection-diffusion d'un scalaire avec ou sans terme source, s'écrit de manière compacte de la façon suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} = \mathbf{S} \quad (4.5)$$

où $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^m$ est le vecteur contenant les m variables conservatives (4 ou 5 pour les équations de Navier-Stokes, pour Ω respectivement dans $\mathbb{R}^2$ ou $\mathbb{R}^3$), $\vec{\mathcal{F}} = (\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{H})^T$ le tenseur des flux de $\mathbf{U}$ et

¹Il faut noter toutefois que l'indice k est aussi utilisé pour la numérotation globale lors de la description de la méthode de Galerkin.

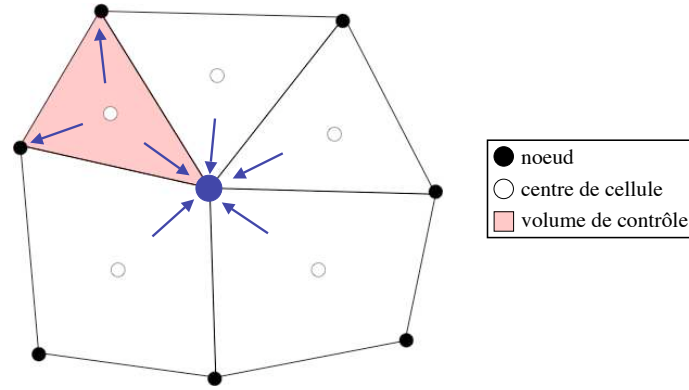


FIG. 4.4 - Représentation d'un maillage hybride et mise en évidence : (1) des contributions d'un élément (coloré ici) vers ses sommets et (2) des contributions des cellules adjacentes à un noeud (ici le noeud au centre du schéma).

$\mathbf{S} \in \mathbb{R}^m$ représente les termes sources. Les différentes variables et leurs flux ont été présentés dans la partie I de cette thèse. Les flux peuvent être explicités selon deux composantes :

$$\vec{\mathcal{F}} = \vec{\mathcal{F}}^C(\mathbf{U}) + \vec{\mathcal{F}}^V(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) \quad (4.6)$$

$\vec{\mathcal{F}}^C$ correspond aux flux convectifs, propres aux équations d'Euler (et ne dépendent que de $\mathbf{U}$) et $\vec{\mathcal{F}}^V$ sont les flux visqueux (dépendant à la fois de $\mathbf{U}$ et de ses gradients).

4.3.2 Discrétisation du domaine de calcul

La première étape de la formulation *cell-vertex* est commune aux méthodes volumes ou éléments finis et consiste à discrétiser, comme on l'a dit dans la section 4.1, le domaine de calcul en un ensemble conforme de polyèdres. Ici, chaque polyèdre (ou *cellule*, *maille* ou encore *élément*) est composé de n_v^e sommets (*vertex-vertices* en anglais) qui constituent les N_h noeuds du maillage. Le principe de résolution de la méthode *cell-vertex* est d'appliquer les bilans des flux des lois de conservation dans les *cellules* primales (ou *éléments* ou *mailles*) du maillage, puis de *redistribuer* aux noeuds pour écrire la mise à jour temporelle des variables conservatives (voir figure (4.4)). Dans cette formulation, le stockage des variables ne se fait pas au centre des volumes de contrôle sur lesquels sont appliqués les bilans, mais aux noeuds (donc aux sommets des éléments).

La résolution de l'équation (4.5) se fait à chaque noeud de discrétisation du maillage et en plusieurs étapes. La première est de réaliser le calcul du résidu (ou *fluctuation*) pour chaque élément K_e . Celui-ci est défini de la manière suivante [200] :

$$\mathbf{R}_e := \frac{1}{V_e} \int_{K_e} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h d\mathcal{V} \quad (4.7)$$

En appliquant le théorème de Green-Gauss à l'équation (4.7)

$$\mathbf{R}_e := \frac{1}{V_e} \oint_{\partial K_e} \vec{\mathcal{F}}_h \cdot \vec{n} dS \quad (4.8)$$

où $\vec{\mathcal{F}}_h$ est l'approximation numérique du flux $\vec{\mathcal{F}}$ et $V_e := \text{mes}(K_e)$ est le volume de la cellule K_e (en 2 dimensions, il s'agit de l'aire).

4.3.3 Métriques

Avant de donner les détails du calcul du résidu, on va rappeler comment sont définies les métriques dans AVBP. Le code de calcul peut être utilisé sur des maillages hybrides (voir figure (4.4)), on peut donc combiner des éléments typiques des maillages structurés (quadrilatères, hexaèdres) et des maillages non-structurés (triangles, tétraèdres), ainsi que des éléments de transition (prismes, pyramides), comme on le voit sur la figure (4.5). La méthode *cell-vertex* repose sur une définition des métriques basée aux cellules (par opposition à une méthode basée aux arêtes comme le code N3SNatur).

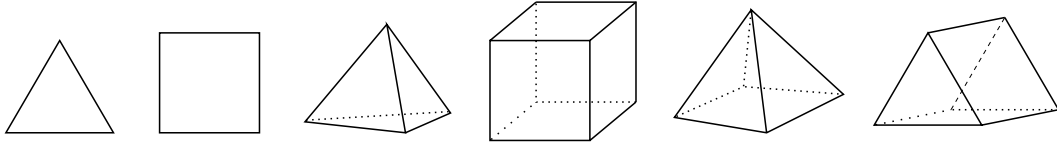


FIG. 4.5 - Les différents éléments pouvant se retrouver dans les maillages utilisés avec le code AVBP. De gauche à droite : triangle, quadrilatère, tétraèdre, hexaèdre, pyramide, prisme

A l'exception des bords du domaine Ω , où le traitement est particulier (on y reviendra plus tard), les normales utilisées dans AVBP sont définies aux sommets des éléments. Pour simplifier le codage et pouvoir appliquer la même formule de calcul du résidu ou des gradients, quel que soit le type d'élément considéré, on définit les normales de la manière suivante :

1. On calcule d'abord les normales $\vec{S}_f$ aux faces f des cellules (pointant vers l'extérieur). Ce calcul inclut la pondération de la normale par l'aire de la face concernée. Il est à noter qu'en général, dans le cas des faces quadrangulaires, les 4 sommets n'appartiennent pas à un même plan. La face est donc divisée en quatre triangles (deux divisions selon les diagonales) et la normale $\vec{S}_f$ est une moyenne des normales aux triangles (voir figure (1)). Cette manière de calculer les normales permet, en particulier, de préserver la linéarité d'une solution (ce qui revient à assurer une convergence du schéma à l'ordre 2 pour des maillages suffisamment réguliers).

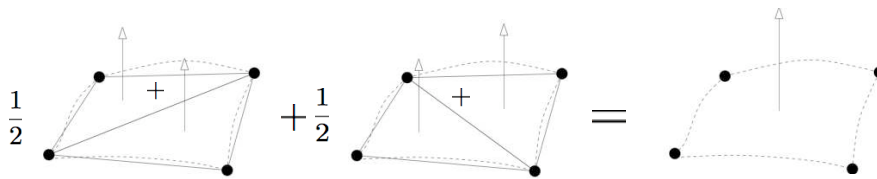


FIG. 4.6 - Calcul de la normale d'une face dont les sommets n'appartiennent pas tous au même plan.

2. La normale $\vec{S}_k$ au sommet k est une combinaison linéaire des normales aux faces adjacentes à k et s'écrit :

$$\vec{S}_k = \sum_{f \ni k} -\frac{d}{n_f} \vec{S}_f \quad (4.9)$$

Le signe "−" apparaît car on a choisi une normale $\vec{S}_k$ pointant vers l'intérieur de la cellule. n_v^f est le nombre de sommets sur la face f et d le nombre de dimensions de Ω . Il faut noter que la normale $\vec{S}_k$ est pondérée par une surface (sa norme n'est pas unitaire). Un exemple pour un quadrilatère est donné sur la figure (4.7).

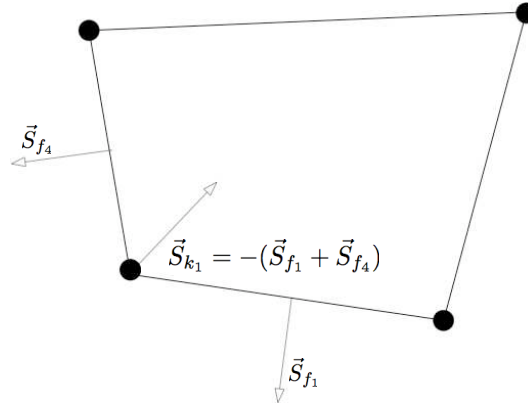


FIG. 4.7 - Calcul des normales aux noeuds dans un quadrilatère quelconque.

Par ailleurs, dans le cas d'éléments linéaires (triangles et tétraèdres), ce calcul revient à obtenir une normale $\vec{S}_k$ égale à la normale de la face opposée au sommet k (figure (4.8)).

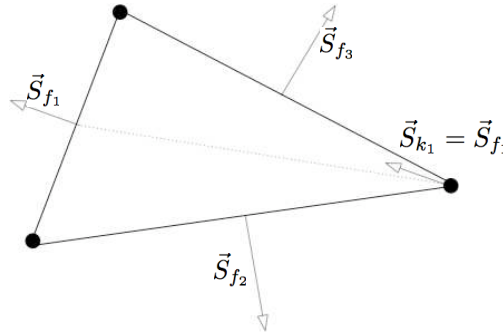


FIG. 4.8 - Calcul des normales aux noeuds dans un triangle quelconque.

Afin d'assurer la consistance des schémas numériques, on vérifie que : $\sum_{k \in K_e} \vec{S}_k = \vec{0}$.

4.3.4 Calcul du résidu et équations aux noeuds

La discrétisation du résidu utilise une intégration des flux suivant une méthode des trapèzes appliquée aux arêtes (ou aux faces selon la dimension), partant de l'hypothèse que les flux varient linéairement

le long des arêtes des éléments (voir section 4.1) [11, 201]. Grâce à la définition des normales (4.9), le résidu à la cellule K_e s'écrit alors, quel que soit le type d'élément considéré² :

$$\mathbf{R}_e = -\frac{1}{dV_e} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \vec{S}_k \quad (4.10)$$

où $\vec{\mathcal{F}}_k = \vec{\mathcal{F}}_h(\vec{x}_k) = \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}_k)$ est l'approximation des flux au sommet $\{k | k \in K_e\}$. De plus, en notant que : $\vec{\nabla} \cdot \vec{x} = d$, on peut définir le volume V_e de la même manière par :

$$V_e = -\frac{1}{d^2} \sum_{k \in K_e} \vec{x}_k \cdot \vec{S}_k \quad (4.11)$$

Une fois les résidus aux cellules calculés, il est nécessaire d'envoyer l'information aux noeuds afin d'obtenir autant d'équations algébriques que d'inconnues et pouvoir réaliser la mise à jour du vecteur solution (figure (4.4)). Le résidu au noeud j s'écrit comme une moyenne des résidus aux cellules adjacentes pondérés par le volume de celles-ci :

$$\mathbf{N}_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \mathbf{D}_{j,e} V_e \mathbf{R}_e \quad (4.12)$$

où $\mathbf{D}_{j,e}$ est une matrice de distribution qui permet de distribuer le résidu du centre de la cellule K_e au noeud j . L'opération d'assemblage des contributions de chaque cellule est appelée *scatter*. Il s'agit de l'opération la plus coûteuse en terme de temps de calcul dans AVBP, car elle fait intervenir des communications et transferts de données aux interfaces entre processeurs, en calcul parallèle, et entre groupe de cellules. Le volume de contrôle V_j associé au noeud j est défini : $V_j = \sum_{e \in \mathcal{D}_j} V_e / n_v^e$. On peut, dès lors, écrire un schéma semi-discret (avec un avancement en temps parfait) :

$$\frac{d\mathbf{U}_j}{dt} = -\mathbf{N}_j \quad (4.13)$$

On remarque que pour le moment, la discrétisation temporelle n'est pas évoquée. Cet aspect sera développé plus en détail dans la suite.

Il est à noter, ici, que pour assurer la *conservativité* du schéma numérique, la somme des matrices de distribution doit être égale à l'identité : $\sum_{k \in K_e} \mathbf{D}_{k,e} = \mathbf{Id}$ [235].

4.4 Les différents schémas de convection *cell-vertex*

Comme on l'a indiqué précédemment, on peut définir différents schémas de convection en fonction de la définition de la matrice $\mathbf{D}_{k,e}$. Cette section présente les différents schémas de convection disponibles dans AVBP. Ici on ne considère que $\vec{\mathcal{F}} = \vec{\mathcal{F}}^C$, la partie convective du flux.

²Le résidu s'écrit de la même façon que le terme spatial de l'équation (4.3). L'hypothèse que les flux varient linéairement le long des arêtes, la définition des normales (4.9) et une recombinaison des termes expliquent le signe "-" dans la formule (4.10) [11].

4.4.1 Différences centrées (DC ou CV)

Il s'agit du schéma numérique le plus simple que l'on puisse définir à partir de la formulation (4.12). En choisissant :

$$\mathbf{D}_{j,e}^{DC} = \frac{1}{n_v^e} \mathbf{Id} \quad (4.14)$$

Le résidu est donc distribué de manière équitable à chaque sommet de l'élément K_e . On montrera par la suite que sur des éléments $P1$, la formulation obtenue correspond à une méthode des éléments finis de Galerkin. Il correspond au schéma "classique" aux différences finies centrées du second ordre sur un maillage régulier mono-dimensionnel [254]. Dans le chapitre suivant, on montrera que ce schéma n'est pas dissipatif mais qu'il est, en revanche, très dispersif [254]. Par ailleurs, il faut noter qu'il est inconditionnellement instable lorsqu'il est associé à une méthode d'avancement explicite d'Euler (d'ordre 1). De ce fait, il est généralement utilisé avec une intégration temporelle Runge-Kutta du troisième ordre. Ce schéma a été très souvent employé, par le passé, dans des applications aérodynamiques stationnaires (y compris sous ses formes *cell-centre* [107] et *vertex-centred* [139]), du fait de sa précision sur maillages assez réguliers et sa simplicité de codage. Il nécessite, cependant, l'ajout quasi-systématique de viscosité artificielle pour assurer sa stabilité dans les cas non-linéaires [107].

4.4.2 Lax-Wendroff (LW)

Ce schéma numérique a été introduit par R-H.Ni [158] puis développé par Hall [91]. Il s'agit de l'adaptation du schéma Lax-Wendroff [119, 118] à la méthode *cell-vertex* [150, 89, 55]. Le schéma LW est, en réalité, un schéma de discrétisation totale puisqu'il combine discrétisations temporelles et spatiales. Le but est de stabiliser le schéma aux différences centrées, associé à une intégration temporelle d'Euler (schéma FTCS pour *forward in time, centred in space*), en introduisant un terme diffusif permettant de supprimer le premier terme de l'erreur de troncature du schéma FTCS, responsable de l'anti-diffusion (et *a fortiori* l'instabilité) et dû à l'intégration temporelle. Cette méthodologie est applicable, non seulement, pour les différences finies mais aussi pour la méthode *cell-vertex* ou les éléments finis.

Le principe de départ est un développement en série de Taylor à l'ordre 3 en temps du m-vecteur solution :

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} = \left. \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right|^n + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right|^n \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (4.15)$$

avec Δt le pas de temps. La méthodologie de Lax et Wendroff consiste à utiliser l'équation (4.5) pour exprimer les dérivées temporelles et à les remplacer par des dérivées spatiales. Ainsi on a :

$$\left. \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right|^n = - \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} \right)^n \quad (4.16)$$

et pour la dérivée d'ordre 2 :

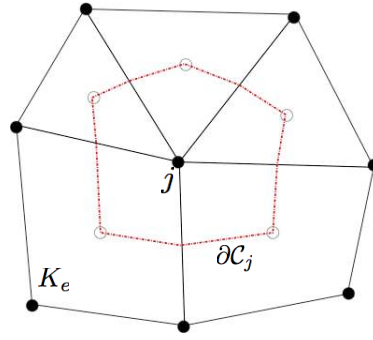


FIG. 4.9 - Volume de contrôle associé au noeud j . $\partial\mathcal{C}_j$ correspond au chemin d'intégration pour la dérivée spatiale d'ordre 2 apparaissant dans le schéma LW.

$$\left. \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right|^n = - \frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} \right)^n \quad (4.17)$$

$$= - \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \vec{\mathcal{F}}}{\partial t} \right)^n \quad (4.18)$$

$$= \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} \right)^n \quad (4.19)$$

L'équation (4.15) s'écrit donc :

$$\frac{\mathbf{U}_j^{n+1} - \mathbf{U}_j^n}{\Delta t} = - \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} \right)^n + \frac{1}{2} \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} \right)^n \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (4.20)$$

Afin de la discrétiser spatialement, l'équation (4.20) est intégrée sur le volume de contrôle associé au noeud j (figure (4.9)), noté $\mathcal{C}_j^3$, ce qui donne⁴ :

$$\frac{\mathbf{U}_j^{n+1} - \mathbf{U}_j^n}{\Delta t} = - \frac{1}{V_j} \int_{\mathcal{C}_j} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} \right)^n d\mathcal{V} + \frac{\Delta t}{2V_j} \int_{\mathcal{C}_j} \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} \right)^n d\mathcal{V} \quad (4.21)$$

$$= - \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{1}{n_v^e} V_e \mathbf{R}_e^n + \frac{\Delta t}{2V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \int_{\partial(\mathcal{C}_j \cap K_e)} \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} \right)^n \cdot \vec{n} dS \quad (4.22)$$

$$= - \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{1}{n_v^e} V_e \mathbf{R}_e^n + \frac{\Delta t}{2dV_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} (\vec{\mathcal{A}}_e \mathbf{R}_e^n) \cdot \vec{S}_{j,e} \quad (4.23)$$

où $\vec{\mathcal{A}}_e = (\bar{\mathbf{A}}_e, \bar{\mathbf{B}}_e, \bar{\mathbf{C}}_e)^T$ et $\bar{\mathbf{A}}_e, \bar{\mathbf{B}}_e$ et $\bar{\mathbf{C}}_e$ sont les matrices jacobienes des flux convectifs dans $\mathcal{M}_m(\mathbb{R})$,

³Le volume $\mathcal{C}_j$ correspond au volume de contrôle utilisé dans une méthode *vertex-centred*. Néanmoins, ici, les métriques de ce volume ne sont pas définies explicitement, ce qui permet d'économiser du temps de calcul et de la mémoire.

⁴Il existe une autre interprétation du volume de contrôle du chemin d'intégration pour le terme dissipatif et pour un quadrilatère : Morton [150], en faisant un lien avec la méthode Taylor-Galerkin, propose d'utiliser la normale à la diagonale opposée au noeud j . Le résultat obtenu est, évidemment, le même.

moyennées au centre de la cellule K_e : $\bar{\mathbf{A}}_e = \frac{1}{n_v^e} \sum_{k|k \in K_e} \mathbf{A}_k$. On obtient finalement :

$$\mathbf{D}_{j,e}^{LW} = \frac{1}{n_v^e} \mathbf{Id} - \frac{\Delta t}{2dV_e} \vec{\mathcal{A}}_e^n \cdot \vec{S}_{j,e} \quad (4.24)$$

On reconnaît deux parties dans la matrice (4.24) : la première correspond aux différences centrées, la seconde a été obtenue en utilisant la méthodologie de Lax et Wendroff. Il s'agit du terme dissipatif et stabilisateur du schéma, évoqué précédemment. Celui-ci permet au schéma LW d'avoir certaines qualités indéniables. Il est **le seul** schéma totalement explicite à 2 niveaux du second ordre en espace **et** en temps avec un *stencil*⁵ aussi compact [60, 8], ce qui le rend, à la fois, précis et peu coûteux. Par ailleurs, le terme dissipatif lui assure une certaine robustesse, dans les cas non-linéaires (contrairement au schéma DC), ce qui est un atout indéniable.

4.5 Méthodes des résidus distribués et éléments finis

4.5.1 Introduction

La méthode *cell-vertex* présentée précédemment appartient (ou tout du moins est très proche) à une classe de schémas numériques appelés schémas à *résidus distribués* (ou *fluctuation splitting*, ou encore *schémas distribués*) dont la formulation a des liens très clairs avec les méthodes *éléments finis* de Galerkin et de Petrov-Galerkin. Dans cette partie, on va, tout d'abord, présenter la méthode *fluctuation splitting* et montrer que le formalisme est très proche des schémas *cell-vertex*. Ensuite, on montrera que ces formulations peuvent être interprétées comme des schémas Petrov-Galerkin ou Galerkin⁶. Cela permettra de montrer les différences entre les approches présentées et introduire les raisons pour lesquelles les schémas Taylor-Galerkin ont été implantés dans AVBP. On ne cherchera pas à donner des détails mathématiques. Les lecteurs, cherchant une formulation plus rigoureuse d'un point de vue mathématique, se référeront à des ouvrages comme [185] ou [8] pour une présentation précise des éléments finis, et aux travaux d'Abgrall et collaborateurs [4, 6, 143, 5] pour la méthode *fluctuation splitting*.

Afin d'étudier les schémas sus-mentionnés, on s'appuiera principalement sur l'équation de convection linéaire à coefficients constants :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} u = 0, \quad (4.25)$$

et donc le flux est égal à ($\vec{c}$ étant constant) :

$$\vec{\mathcal{F}} = \vec{c} u$$

On considère ici des éléments P1 et une vitesse de convection homogène. Il existe toutefois des formulations pour des éléments d'ordres supérieurs [7] et bilinéaires [2].

⁵Le *stencil* correspond au nombre de points ou de cellules qui sont impliqués dans la mise à jour de la solution à un noeud donné

⁶Les méthodes de Galerkin sont parfois appelées Bubnov-Galerkin, par opposition à Petrov-Galerkin.

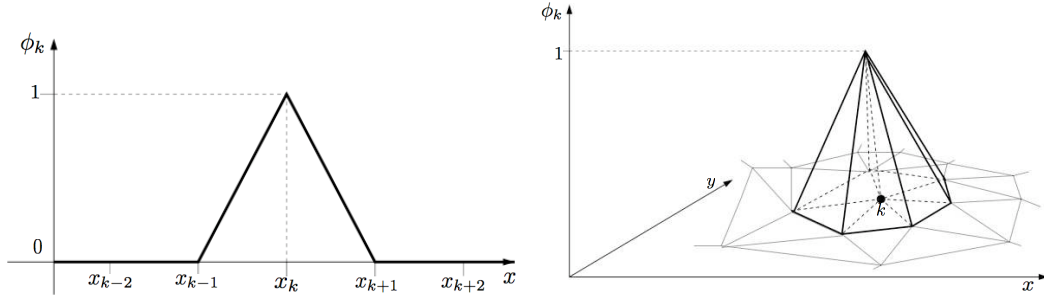


FIG. 4.10 - Gauche : Fonction chapeau pour un maillage monodimensionnel régulier ; Droite : Fonction chapeau sur un maillage bidimensionnel non structuré

4.5.2 Méthodes *fluctuation splitting*

Les méthodes *fluctuation splitting* tiennent leur origine dans le travail de Philip Roe [197] et sont une alternative aux schémas décentrés volumes finis classiques pour la discrétisation des équations hyperboliques. Dans le cas de l'étude de la convection linéaire, les formulations *cell-vertex* et *fluctuation splitting* sont équivalentes [202].

A la manière de la méthode des éléments finis, le domaine de calcul Ω est discrétisé en triangles (ou tétraèdres) (cf. équation (4.2)) et la solution est approximée de la manière suivante :

$$u_h(\vec{x}, t) = \sum_{k=1}^{N_h} U_k(t) \phi_k(\vec{x}) \quad (4.26)$$

où $\phi_k(\vec{x})$ sont les fonctions de forme associées à k . Dans les cas présents, il s'agit des classiques fonctions "chapeaux" ou "tentés", continues et linéaires par morceaux et définies par (figure (4.10)) :

$$\begin{cases} \phi_k(\vec{x}) = 1 \text{ si } \vec{x} = \vec{x}_k \\ \phi_k(\vec{x}) = 0 \text{ si } \vec{x} \neq \vec{x}_k \end{cases} \quad (4.27)$$

A l'instar de la méthode *cell-vertex*, on introduit le calcul d'un résidu. Ici il est appelé *fluctuation* par Roe et se calcule de la manière suivante pour l'équation (4.25) :

$$\Phi_e = \int_{K_e} \vec{\nabla} \cdot \vec{F}_h dV = \oint_{\partial K_e} \vec{F} \cdot \vec{n} dS \quad (4.28)$$

$$= \oint_{\partial K_e} u_h \vec{c} \cdot \vec{n} dS \quad (4.29)$$

$$(4.30)$$

En introduisant la grandeur définie à un sommet l^7 :

$$k_l = -\frac{1}{d} \vec{c} \cdot \vec{S}_l$$

et en suivant la même méthode d'intégration (trapèzes) que pour l'équation (4.10.), on obtient :

$$\Phi_e = \sum_{l \in K_e} k_l U_l \quad (4.31)$$

Clairement, il apparaît que :

$$R_e V_e = \Phi_e \quad (4.32)$$

De la même manière pour les deux approches, les résidus sont distribués aux sommets des cellules à l'aide de coefficients (ou matrices) de distribution $D_{j,e}$. On notera qu'historiquement, les méthodes *cell-vertex* ont été développées, dans un premier temps, pour écrire des schémas centrés (présentés à la section 4.4) tandis que les schémas *fluctuation splitting*, mentionnés dans la littérature (N, LDA, PSI [59, 235, 143]), sont des schémas décentrés "amont". Toutefois, étant donné que les deux discrétisations sont identiques dans le cadre d'équations de convection linéaire⁸, tout schéma développé pour une méthode est valable pour l'autre.

4.5.3 Schémas décentrés

Lors de cette thèse, on présente brièvement les schémas codés dans AVBP. Il s'agit des trois schémas *fluctuation splitting* les plus répandus : N (pour *Narrow*), LDA (pour *Low Diffusion A*) et PSI (*Positive Streamwise Invariant*). On va rappeler, dans un premier temps, les principes de base de ces schémas pour le cas 2D. La généralisation aux cas 3D peut être trouvée dans la thèse de van der Weide [249], par exemple.

La caractéristique des schémas amont distributifs (au même titre que le schéma SUPG [9]) est de traiter différemment les triangles pour lesquels l'écoulement entre par un ou deux côtés, afin de prendre en compte le sens de propagation des ondes. Dans le premier cas, seul le point situé le plus en aval reçoit le résidu (figure 4.11). Dans le second cas, il n'y a qu'un noeud en amont et deux en aval, ces deux derniers se partagent le résidu (figure 4.11). Dans les deux types de triangle, les sommets en amont ne sont donc pas modifiés (pour le triangle considéré) : c'est ce qui caractérise la propriété de décentrement amont ('*Upwinding*') de ces schémas numériques. On peut l'écrire aussi :

$$\text{Noeud(s) amont(s)} : k_l < 0 \text{ donc } D_{l,e} = 0$$

Comme l'explique Struijs [235], dans le cas 1 cible, le schéma qui consiste à envoyer le résidu au seul noeud aval est à la fois amont, positif (respect du principe du maximum), donc la solution reste bornée et préserve la linéarité (on rappelle que cela signifie qu'une solution *stationnaire* linéaire est préservée et que cette propriété est liée à une précision à l'ordre 2). Les schémas qu'on présente sont tous les trois

⁷A l'attention des habitués des méthodes *fluctuation splitting* : on garde ici les conventions (orientations des normales...) et les notations (indices...) choisies pour présenter l'approche *cell-vertex*.

⁸Il en est de même pour l'équation de Burgers non visqueuse $\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} = 0$, avec une linéarisation conservative.

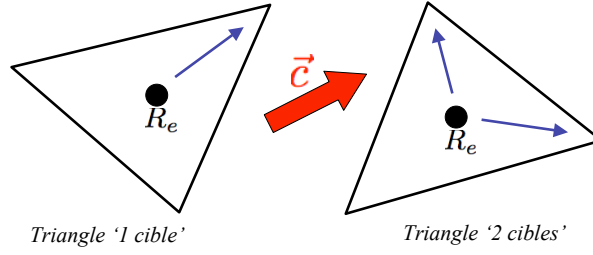


FIG. 4.11 - Deux cas typiques pour un triangle. Soit 1 sommet est en aval (à gauche) et il est le seul à recevoir le résidu, soit deux sommets sont en aval (à droite) et ils se partagent le résidu.

identiques dans ce cas (il en va de même pour un tétraèdre à 1 cible). C'est donc pour le triangle à deux cibles que les approches diffèrent (par extension, pour les tétraèdres à 2 ou 3 cibles - voir [249]).

On introduit les notations suivantes qui seront utiles pour la définition des schémas amont qui suivent :

$$\begin{aligned} k_l^+ &= \max(0, k_l) \\ k_l^- &= \min(0, k_l) \\ U_{e,in} &= \frac{1}{\sum_{l \in K_e} k_l^-} \sum_{l \in K_e} k_l^- U_l \end{aligned}$$

et $U_{e,in}$ correspond à la valeur de u_h dans le triangle K_e au point d'entrée de l'écoulement⁹. Ces notations vont permettre de définir les contributions $\Phi_{j,e}$ aux résidus aux noeuds pour chaque schéma, quel que soit le type de triangle (ou de tétraèdre) considéré. On a de plus :

$$N_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} D_{j,e} V_e R_e = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \Phi_{j,e}$$

Schéma N

Son nom (*Narrow*) provient du fait qu'il s'agit du schéma ayant le plus petit stencil parmi les schémas amont linéaires¹⁰ [235]. Le résidu à un sommet j s'écrit :

$$\boxed{\Phi_{j,e}^N = k_j^+ (U_j - U_{e,in})} \quad (4.33)$$

Comme le montre van der Weide [249], on peut interpréter géométriquement ce schéma pour le triangle à 2 cibles de la manière suivante. Si on note 1 et 2 les deux points en aval, le vecteur vitesse $\vec{c}$ est décomposé en deux parties $\vec{c} = \vec{c}_1 + \vec{c}_2$, suivant les directions des arêtes reliant le point 3 (amont) au point aval 1 ou 2. Les contributions aux points 1 et 2 correspondent alors aux résidus construits avec $\vec{c}_1$

⁹Ce point d'entrée correspond au seul point amont pour le triangle à 2 cibles et à la projection suivant la direction de $\vec{c}$ du seul point aval sur l'arête où l'écoulement entre dans le cas à 1 cible.

¹⁰Un schéma est dit linéaire si les coefficients pour le définir ne dépendent pas de la solution

et $\vec{c}_2$ au lieu $\vec{c}$ (voir figure 4.12). Si on somme les 2 contributions, on retrouve bien le résidu R_e :

$$\begin{aligned}
 \Phi_{1,e} + \Phi_{2,e} &= R_e(\vec{c}_1)V_e + R_e(\vec{c}_2)V_e \\
 &= \oint_{\partial K_e} u_h \vec{c}_1 \cdot \vec{n} dS + \oint_{\partial K_e} u_h \vec{c}_2 \cdot \vec{n} dS \\
 &= \oint_{\partial K_e} u_h \vec{c} \cdot \vec{n} dS \\
 &= R_e V_e
 \end{aligned}$$

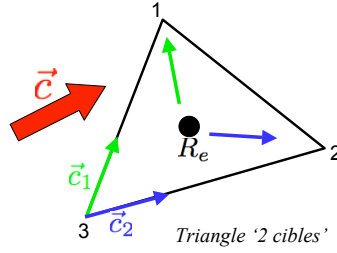


FIG. 4.12 - Schéma N pour un triangle à 2 cibles. Le vecteur vitesse se décompose en deux composantes $\vec{c}_1$ et $\vec{c}_2$ qui permettent de construire les contributions aux sommets en aval.

Le schéma N est amont et positif [235, 249, 143]. Comme les coefficients $R_{j,e}/N_j$ se sont pas bornés quand R_e tend vers zéro, le schéma N ne préserve pas la linéarité et ne peut pas être interprété comme un schéma de type Petrov-Galerkin [249, 143].

Schéma LDA

Le coefficient de distribution du schéma LDA est le suivant [249] :

$$D_{j,e}^{LDA} = \frac{k_j^+}{\sum_{l \in K_e} k_l^+} \quad (4.34)$$

Le schéma LDA peut aussi être interprété géométriquement pour un triangle à 2 cibles. Il partage le résidu R_e entre les deux triangles définis par le point amont, un point aval et le point de sortie P_{out} , qui correspond à la projection suivant la direction $\vec{c}$ du point amont sur l'arête d'où sort l'écoulement. La pondération pour le partage du résidu est fonction de l'aire des triangles [235] (voir figure 4.13).

Le schéma obtenu est amont et préserve la linéarité, la précision est donc accrue par rapport au schéma N. En revanche, la positivité est perdue dans l'opération car le schéma est linéaire (cf. théorème de Godunov).

Schéma PSI

Ce schéma a été introduit par Struijs [235] pendant sa thèse. Il possède toutes les propriétés intéressantes des schémas N et LDA. En effet, il est amont, positif et préserve la linéarité (PSI est non

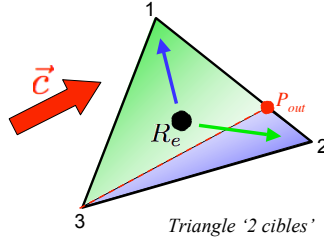


FIG. 4.13 - Schéma LDA pour un triangle à 2 cibles. Le résidu est partagé entre les points 1 et 2 en fonction de l'aire des triangles $12P_{out}$ et $13P_{out}$.

linéaire). Le coefficient de distribution correspondant est le suivant :

$$D_{j,e}^{PSI} = \frac{\max(0, D_{j,e}^N)}{\sum_{l \in K_e} \max(0, D_{l,e}^N)} \quad (4.35)$$

où $D_{j,e}^N = \frac{\Phi_{j,e}^N}{R_e V_e}$. En outre, Sidilkover et Roe [224] ont montré, par la suite, que le schéma PSI peut être interprété comme un schéma N limité (par le limiteur minmod).

Remarques

- On peut écrire aussi le schéma LW dans ce formalisme. Pour le différencier du schéma précédemment présenté (Eq.(4.24)), on l'appellera schéma LW-scalaire. On a alors :

$$D_{j,e}^{LWs} = \frac{1}{d+1} + \frac{\Delta t}{2V_e} k_j \quad (4.36)$$

Pour la convection linéaire, on notera que les équations (4.24) et (4.36) sont équivalentes. Le premier terme de $D_{j,e}^{LWs}$ correspond au coefficient de distribution qu'on obtient en appliquant la méthode de Galerkin (différences centrées) et le deuxième est la contribution LW.

- Tous ces schémas sont construits, à la base, pour des problèmes stationnaires. Néanmoins, on peut les utiliser avec une intégration temporelle de type Euler (ce qu'on fera pour les tester), ce qui réduit quelque peu leur précision.

4.5.4 Lien avec les éléments finis

Plusieurs auteurs ont mentionné le fait que les méthodes de distribution des résidus (donc la méthode *cell-vertex* dans le cas présent) peuvent être formulées comme une méthode Petrov-Galerkin (en général, pour les schémas décentrés) ou Galerkin (schéma classique aux différences centrées) [153, 143, 7]. Si on part de l'équation de convection (4.25), alors appliquer la méthode des résidus pondérés à l'équation (4.25) revient à résoudre le problème qui consiste à trouver u_h dans l'espace des solutions, telle que [264, 100, 185] :

$$\left\langle \frac{\partial u_h}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h \middle| w_j \right\rangle = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u_h}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h \right) w_j dV = 0 \quad \forall j \in [1, N_h] \quad (4.37)$$

où w_j est une fonction poids (ou test) associée au noeud j .

Si $w_j = \phi_j$, on parle de méthode des éléments finis de Galerkin, si $w_j \neq \phi_j$ alors il s'agit d'une méthode de Petrov-Galerkin. Lorsque l'expression (4.26) est injectée dans (4.37), on obtient :

$$\int_{\Omega} \sum_{k=1}^{N_h} \frac{dU_k}{dt} \phi_k w_j d\mathcal{V} + \int_{\Omega} \sum_{k=1}^{N_h} U_k \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} = 0 \quad \forall j \in [1, N_h], \quad (4.38)$$

soit :

$$\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \sum_{k=1}^{N_h} \frac{dU_k}{dt} \phi_k w_j d\mathcal{V} + \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \sum_{k=1}^{N_h} U_k \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} = 0 \quad \forall j \in [1, N_h], \quad (4.39)$$

qu'on peut réécrire, compte tenu de la compacité du support des ϕ_k , sous la forme :

$$\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \frac{dU_k}{dt} \int_{K_e} \phi_k w_j d\mathcal{V} + \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} U_k \int_{K_e} \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} = 0 \quad \forall j \in [1, N_h]. \quad (4.40)$$

Ici, en isolant la partie spatiale (second terme) de (4.48), on peut faire apparaître le résidu R_e (ou la fluctuation Φ_e) en utilisant la relation classique liant le gradient de la fonction de forme liée au sommet k avec la normale à la face opposée à k (pour des éléments P1) :

$$\boxed{\vec{\nabla} \phi_k = -\frac{\vec{S}_k}{dV_e}, \quad k \in K_e} \quad (4.41)$$

Le résidu apparaît alors :

$$\sum_{k \in K_e} \int_{K_e} U_k \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} = \left(\sum_{k \in K_e} U_k \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k \right) \int_{K_e} w_j d\mathcal{V} \quad (4.42)$$

$$= R_e \int_{K_e} w_j d\mathcal{V} \quad (4.43)$$

Lorsqu'on utilise la méthode de Galerkin, on a $\int_{K_e} w_j d\mathcal{V} = \int_{K_e} \phi_j d\mathcal{V} = V_e/n_v^e$. Ainsi, on retrouve le terme $R_e V_e/n_v^e$ de l'équation (4.12) pour un schéma centré. De la même manière, si on utilise pour la fonction test w_j , la fonction caractéristique $\{\chi_j = 1 \quad \forall \vec{x} \in \mathcal{C}_j \text{ et } \chi_j = 0 \text{ sinon}\}$, on obtient le même résultat.

Selon la définition des fonctions tests que l'on utilise, on peut faire apparaître différents coefficients ou matrices de distributions et introduire, comme dans le cas des méthodes *fluctuation splitting*, un biais vers l'amont de l'écoulement pour construire les schémas décentrés, mentionnés section 4.5.2. C'est ainsi que

l'on peut obtenir un schéma SUPG (pour Streamwise Upwind Petrov-Galerkin) [235, 9] ou les schémas scalaires LDA et PSI présentés (section 4.5.3) [59, 235, 143] en écrivant [249, 103] :

$$w_j = \phi_j + \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \left(D_{j,e} - \frac{1}{d+1} \right) \chi_j \quad (4.44)$$

où $D_{j,e}$ correspond au coefficient de distribution du schéma choisi.

On peut reformuler l'équation (4.39) de manière plus compacte :

$$\boxed{\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \mathcal{M}_{jk}^e \frac{dU_k}{dt} + \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \mathcal{K}_{jk}^e U_k = 0 \quad \forall j \in [1, N_h].} \quad (4.45)$$

avec :

$$\mathcal{M}_{jk}^e = \int_{K_e} \phi_k w_j d\mathcal{V} \quad (4.46)$$

$$\mathcal{K}_{jk}^e = \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} \quad (4.47)$$

où $\mathcal{M}_{jk}^e$ permet de construire la matrice de masse et $\mathcal{K}_{jk}^e$ une matrice de rigidité. Du fait de la compacité du support sur lequel ϕ_k et w_j sont non-nulles, les matrices sus-nommées sont creuses et leurs éléments sont nuls pour tout k n'appartenant pas à un proche voisinage de j (c'est-à-dire j lui-même et les noeuds appartenant aux cellules adjacentes à j). Sous forme matricielle, on obtient :

$$[\mathcal{M}] \frac{d\{U\}}{dt} + [\mathcal{K}] \{U\} = 0 \quad (4.48)$$

avec :

$$\mathcal{M}_{jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \mathcal{M}_{jk}^e \quad (4.49)$$

$$\mathcal{K}_{jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \mathcal{K}_{jk}^e \quad (4.50)$$

4.5.5 Matrice de masse et intégration temporelle

L'apparition de la matrice de masse a un défaut majeur : le schéma numérique obtenu est *implicite* en espace, ce qui implique une inversion de matrice. En pratique, une première approximation de taille est réalisée concernant la partie temporelle (premier terme dans (4.39)) et permet d'obtenir un schéma totalement *explicite*. Si on revient aux schémas *cell-vertex* ou *fluctuation splitting*, précédemment cités et appliqués à l'équation (4.25), l'intégration spatiale du terme temporel s'écrit simplement :

$$\int_{\Omega} \frac{dU_h}{dt} w_j d\mathcal{V} = \frac{dU_j}{dt} V_j \quad \forall j \in [1, N_h] \quad (4.51)$$

Cela revient, physiquement, à supposer que la dérivée temporelle est constante au sein du volume V_j , ce qui est une hypothèse assez forte et limite la précision du schéma. Mathématiquement, cela se traduit par la condensation de la matrice de masse $\{\mathcal{M}\}$ (*lumped mass matrix*)[100] et on écrit :

$$\mathcal{M}_{jj}^{lumped} = \sum_{k=1}^{N_h} \mathcal{M}_{jk} = V_j \quad (4.52)$$

$$\mathcal{M}_{jk}^{lumped} = 0 \quad \forall k \neq j \quad (4.53)$$

Lorsque tous ces schémas ont été développés, le but était de simuler des écoulements stationnaires [55, 201]. L'approximation (4.51) n'était alors pas considérée comme étant problématique, vu l'absence d'intérêt de la dérivée temporelle (qui est nulle quand l'état stationnaire est atteint). En revanche, dans le cadre de la simulation des écoulements instationnaires, un calcul plus exact peut s'avérer très avantageux voire nécessaire, malgré un coût supplémentaire. Certains schémas *upwind fluctuation splitting*, comme le schéma LDA, préservent la linéarité de la solution, ce qui assure une convergence d'ordre 2 pour un calcul stationnaire. Le passage en instationnaire, avec une matrice condensée, lui fait irrémédiablement perdre un ordre de précision. Pour les schémas centrés (DC ou LW), le résultat est moins dramatique. L'ordre de convergence de 2 est préservé grâce au stencil symétrique [103], mais il suffit de rappeler que, sur un maillage régulier mono-dimensionnel, la méthode de Galerkin avec des éléments P1 permet une convergence à l'ordre 4 (avec une dérivation temporelle parfaite néanmoins !) alors qu'un schéma aux différences centrées (ce qui correspond au cas avec une matrice de masse condensée) n'est précis qu'à l'ordre 2 [221]. D'une manière générale, l'erreur de dispersion est bien plus faible, dès lors que la matrice de masse n'est pas condensée.

Une implantation de la méthode des éléments finis de Galerkin (avec inversion de la matrice de masse) est codée dans AVBP. Toutefois, en raison de performances moins intéressantes et un coût de calcul supérieur aux schémas Taylor-Galerkin (l'intégration temporelle est réalisée avec une méthode de Runge-Kutta à 3 étapes), le schéma Galerkin éléments finis est peu utilisé.

4.5.6 Cas des systèmes d'équations non linéaires

Approximation du produit et éléments finis de groupe

Ici, on va étudier le passage à un système de lois de conservation non linéaires. Tant que les flux s'expriment comme une combinaison linéaire des variables de $\mathbf{U}$, il n'y a pas d'incompatibilité entre la relation (4.26) et :

$$\vec{\mathcal{F}}_h(\vec{x}, t) = \sum_{k=1}^{N_h} \vec{\mathcal{F}}_k(t) \phi_k(\vec{x}) \quad (4.54)$$

Dans le cas de l'équation de convection linéaire (4.25), cette relation est consistante avec (4.26) car les flux sont effectivement linéaires en fonction de u .

En revanche, dès lors qu'on étudie des équations de convection non linéaires, cela n'est plus le cas. Supposer, à la fois, que la solution et les flux utilisent les mêmes fonctions d'interpolation est une hypothèse souvent réalisée, mais dont les effets peuvent s'avérer non négligeables. Rudgyard [202] et Crumpton et al [55] parlent alors d'une *approximation du produit des variables*.

Ce type d'approximation peut se rencontrer dans plusieurs cas, en voici deux exemples :

- La résolution des équations de Navier-Stokes stationnaires avec les méthodes *cell-vertex* [55] nécessitent l'utilisation de la relation (4.54) pour le calcul des termes de convection (comme on l'a vu dans la partie précédente) mais aussi l'équation (4.26) pour la construction des flux diffusifs (on verra pourquoi section 4.8).
- L'*approximation du produit des variables* est aussi souvent réalisée dans le cadre de la méthode des éléments finis, avec matrice de masse consistante, pour résoudre les équations d'Euler ou de Navier-Stokes.

Il reste à savoir dans quelle mesure considérer à la fois (4.26) et (4.54) dégrade la précision du résultat obtenu. Cette question est étudiée en détail par C.A.J Fletcher [75]. Il a étudié ce problème pour la discrétisation de différentes lois de conservation et a ainsi introduit la notion d'*éléments finis de groupe* (*group finite elements*), lorsque l'*approximation du produit des variables* est utilisée plutôt que la méthode conventionnelle des éléments finis. Il précise que deux étapes doivent être respectées pour parler de ce type de discrétisation :

- Les équations sont sous forme conservative,
- Un seul type d'interpolation est utilisé pour les termes apparaissant dans les termes différentiels des équations ($\mathbf{U}$ et $\vec{\mathcal{F}}$ pour l'équation (4.5)).

On le verra dans la section 4.6, le développement des schémas éléments finis de Galerkin ou Taylor-Galerkin dans AVBP repose sur cette formulation d'*éléments finis de groupe*. Fletcher [75] montre que la formulation conventionnelle des éléments finis devient très coûteuse, lorsqu'utilisée avec des équations non-linéaires, et que l'approche *éléments finis de groupe* permet d'économiser du temps de calcul (beaucoup de produits de variables) et ce, de façon sensible (voir tableau 10.10, p 357 de [75]). Il montre, en outre, que ce gain ne s'accompagne pas d'une perte de précision sensible, l'ordre du schéma restant, en effet, le même. Dans un cas comme la résolution de l'équation de Burgers sans terme visqueux, il semble que les résultats obtenus soient même plus satisfaisants (moins d'oscillations près des discontinuités). Pour toutes ces raisons, Fletcher préconise l'utilisation des *éléments finis de groupe* pour la résolution de systèmes de lois de conservation non linéaires, comme les équations d'Euler.

Si on applique la méthode des résidus pondérés (de la même manière qu'au paragraphe 4.5.4) à l'équation (4.5), en utilisant en outre (4.26) (adaptée à $\mathbf{U}$) et (4.54), alors on a :

$$\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \frac{d\mathbf{U}_k}{dt} \int_{K_e} \phi_k w_j d\mathcal{V} + \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} = 0 \quad \forall j \in [1, N_h]. \quad (4.55)$$

Sous forme matricielle (avec $\Omega \in \mathbb{R}^3$), on peut écrire :

$$[\mathcal{M}] \frac{d\{\mathbf{U}\}}{dt} + [\mathcal{K}_x]\{\mathbf{F}\} + [\mathcal{K}_y]\{\mathbf{G}\} + [\mathcal{K}_z]\{\mathbf{H}\} = 0 \quad (4.56)$$

$$\text{ou} \quad [\mathcal{M}] \frac{d\{\mathbf{U}\}}{dt} + [\vec{\mathcal{K}}] \cdot \{\vec{\mathcal{F}}\} = 0 \quad (4.57)$$

où :

$$\mathcal{K}_{x,jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \frac{\partial \phi_k}{\partial x} w_j d\mathcal{V} \quad \text{et} \quad \mathcal{K}_{y,jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \frac{\partial \phi_k}{\partial y} w_j d\mathcal{V} \quad (4.58)$$

$$\mathcal{K}_{z,jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \frac{\partial \phi_k}{\partial z} w_j d\mathcal{V} \quad \text{et} \quad \vec{\mathcal{K}}_{jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} \quad (4.59)$$

Là aussi, il faut noter que l'on peut faire apparaître le résidu *cell-vertex* (4.10) et l'équation nodale (4.12) en j dans l'équation (4.55) en utilisant la relation (4.41) et la méthode de Galerkin ($w_j = \phi_j, \forall j$) :

$$\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k \phi_j d\mathcal{V} = \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k \phi_j d\mathcal{V} \quad (4.60)$$

$$= \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \sum_{k \in K_e} \left(\vec{\mathcal{F}}_k \cdot \vec{\nabla} \phi_k \int_{K_e} \phi_j d\mathcal{V} \right) \quad (4.61)$$

$$= \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{V_e}{n_v^e} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \vec{\nabla} \phi_k \quad (4.62)$$

$$= \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{V_e}{n_v^e} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \left(\frac{-\vec{S}_k}{dV_e} \right) \quad (4.63)$$

soit :

$$\boxed{\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k \phi_j d\mathcal{V} = \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{1}{n_v^e} \mathbf{R}_e V_e = \mathbf{N}_j V_j} \quad (4.64)$$

NB : on rappelle que ces développements ont été faits pour des éléments P1. On verra que le traitement des éléments bi- et trinéaires est différent.

Variables de Roe

Il existe toutefois une élégante alternative qui a pour origine les travaux de Philip Roe et il s'agit de celle utilisée avec les techniques *fluctuation splitting*. Celle-ci consiste à discrétiser la formulation quasi-linéaire des équations de conservation écrites sous la forme (4.5) :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{\nabla} \mathbf{U} = \mathbf{0} \quad (4.65)$$

Le calcul du résidu fait alors intervenir les variables de Roe (notées $\mathbf{Z}$, voir [235] par exemple, pour leur expression). En effet, les variables conservatives $\mathbf{U}$ et les flux convectifs $\vec{\mathcal{F}}^C$ s'expriment comme des relations bilinéaires en fonction de $\mathbf{Z}$. On a alors [60] :

$$\int_{K_e} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h d\mathcal{V} = \int_{K_e} \underbrace{\frac{\partial \vec{\mathcal{F}}}{\partial \mathbf{Z}}(\mathbf{Z}_h)}_{\text{linéaire en } \mathbf{Z}_h} \underbrace{\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{U}}(\mathbf{Z}_h)}_{\text{linéaire en } \mathbf{Z}_h} \cdot \vec{\nabla} \mathbf{U}_h d\mathcal{V} \quad (4.66)$$

$$= \frac{\partial \vec{\mathcal{F}}}{\partial \mathbf{Z}}(\bar{\mathbf{Z}}_e) \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{U}}(\bar{\mathbf{Z}}_e) \cdot \left(\vec{\nabla} \mathbf{U}_h \right)_e V_e \quad (4.67)$$

$$= \vec{\mathcal{A}}(\bar{\mathbf{Z}}_e) \cdot \left(\vec{\nabla} \mathbf{U}_h \right)_e V_e \quad (4.68)$$

où $\bar{\mathbf{Z}}_e = \frac{1}{n_e} \sum_{k \in K_e} \mathbf{Z}_k$ est la moyenne de $\mathbf{Z}$ dans l'élément K_e . La définition de $\mathbf{Z}$, celle de la moyenne $(\cdot)_e$ et l'hypothèse de linéarité de la solution (4.26) permettent aux relations de linéarisation (4.66)-(4.68) d'être conservatives, de satisfaire la propriété U [196, 235] et d'être exactes¹¹. Cette méthodologie a, tout de même, le désavantage d'être bien plus coûteuse que les éléments finis de groupe (matrices de passage à chaque noeud pour passer de $\mathbf{U}$ à $\mathbf{Z}$).

4.6 Schémas de la famille Taylor-Galerkin

Dans le paragraphe 4.5.4, on a mis en évidence le fait que la méthode *cell-vertex* volumes finis peut être réinterprétée comme une méthode des éléments finis (de groupe) de Galerkin ou de Petrov-Galerkin avec condensation de la matrice de masse, **pour des éléments P1**. Ainsi, le passage aux éléments finis (en incluant la matrice de masse et son inversion) paraît une extension naturelle des schémas déjà codés dans AVBP. Ceci est un point de départ pour expliquer le développement des schémas Taylor-Galerkin. Les termes spatiaux étant déjà codés (cf. équations (4.42) et (4.43)), il reste encore la matrice de masse ainsi que son inversion à inclure. Dans cette section, on va tout d'abord présenter le schéma de base de cette famille : Euler-Taylor-Galerkin et rappeler la raison pour laquelle il n'est pas un candidat idéal pour la résolution d'un système d'équations non-linéaires. Cela permettra d'introduire les schémas Taylor-Galerkin à deux étapes, intégrés dans AVBP.

4.6.1 Euler-Taylor-Galerkin (ETG) pour la convection scalaire

Le premier schéma Taylor-Galerkin (TG) a été introduit à l'origine par Donéa [62], puis a été développé par Donéa et al. [63]. La méthode de Galerkin, comme on l'a démontré, permet d'obtenir des schémas de type différences centrées. L'ajout de la matrice de masse permet d'obtenir de bien meilleurs résultats grâce à une diminution sensible de l'erreur de dispersion. En revanche, elle a aussi tendance à diminuer le domaine de stabilité après une discrétisation temporelle standard (Euler, Leap-Frog, Crank-Nicolson¹²). Ces discrétisations temporelles, en outre, introduisent des erreurs qui compensent les avantages acquis grâce aux éléments finis.

Un des défauts majeurs des éléments finis de Galerkin, à l'instar des schémas centrés en différences

¹¹Le calcul des gradients est décrit paragraphe 4.8

¹²Nicolson vient de la mathématicienne Phyllis Nicolson (1917-1968). Or son nom est souvent écrit dans la littérature 'Nicholson'. L'orthographe exacte est sans 'h'.

finies, vient de leur incapacité à dissiper les *wiggles* dans les problèmes de convection(-diffusion) stationnaire. La conséquence a été le développement de schémas décentrés *amont*, à l'aide de la méthode de Petrov-Galerkin, afin d'introduire un biais vers l'amont (les fonctions tests étant construites en utilisant les gradients de vitesse, par exemple) et une diffusion plus fine (uniquement dans le sens de l'écoulement - *streamwise diffusion*) que les méthodes de viscosité artificielle scalaire (voir section 4.11). Ainsi ont été introduites les méthodes de stabilisation, telle que SUPG [9]. Celles-ci restent surtout avantageuses pour des cas de convection-diffusion stationnaire. Dans le cadre d'une convection instationnaire, en revanche, la diffusion est souvent jugée excessive [221].

Morton et Parrott [152] ont donc développé des schémas Petrov-Galerkin centrés pour discrétiser l'équation de convection linéaire monodimensionnelle, dont les fonctions tests sont choisies afin d'annuler le terme principal de l'erreur de troncature temporelle. Les résultats obtenus sont très encourageants et nettement supérieurs à ceux fournis par les discrétisations en différences finies équivalentes. Leur généralisation, pour les cas non-linéaires et multidimensionnels, est toutefois complexe.

Sur ces idées, Jean Donéa [62] a introduit la classe des schémas Taylor-Galerkin. Il présente ainsi les schémas Euler-Taylor-Galerkin (ETG, appelé aussi parfois Lax-Wendroff-Taylor-Galerkin [63, 219]), Crank-Nicolson-Taylor-Galerkin (CNTG) et Leap-Frog-Taylor-Galerkin (LFTG). Ils sont la combinaison de la méthode Taylor-Galerkin qu'on va présenter avec les intégrations temporelles Euler, Crank-Nicolson et Leap-Frog. On ne va décrire que le schéma ETG. En effet, les deux autres, bien que plus précis (ordre 4 en espace et en temps) présentent respectivement deux désavantages très conséquents : le premier est implicite en temps, le second est un schéma à 3 niveaux (donc un coût mémoire conséquent). De nombreuses recherches ont été réalisées depuis sur les schémas Taylor-Galerkin, y compris dans des domaines autres que la mécanique des fluides. On citera parmi les équipes très actives, celle de A.J. Baker [15] qui a généralisé les idées de Donéa et a introduit le concept de *Taylor Weak Statement* (TWS) intégrant les schémas SUPG, GALS (*Galerkin Least Squares* [185]) et TG.

L'idée de base reprend celle de Lax et Wendroff [119] et repose sur trois étapes :

- La solution au temps $t = t^{n+1}$ est exprimée sous la forme d'une série de Taylor en temps, à partir de la solution $t = t^n$. Comme il faut garder à l'esprit que les avantages apportés par les éléments finis (en terme de précision) peuvent être annulés par une discrétisation temporelle d'ordre faible, la série de Taylor est réalisée jusqu'à l'ordre 4 (3 pour LW). Après reformulation pour faire apparaître une intégration temporelle de type Euler, on a :

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|^n + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|^n \Delta t + \frac{1}{6} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right|^n \Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (4.69)$$

- Les dérivées temporelles sont remplacées par des dérivées spatiales équivalentes, à l'aide de l'équation à résoudre (4.25). Les deux premières dérivées sont exprimées comme pour le schéma LW (voir équations (4.16) et (4.19) avec $\vec{\mathcal{F}} = c u \vec{e}_x$ et $\vec{\mathcal{A}} = c \vec{e}_x$). La dérivée troisième est, quant à elle, remplacée de manière différente :

$$\left. \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right|^n = \frac{\partial}{\partial t} \left(\left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|^n \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{c} \cdot \vec{\nabla} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u) \right) = \frac{1}{\Delta t} \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \left(\vec{c} \cdot (\vec{\nabla} u^{n+1} - \vec{\nabla} u^n) \right) \quad (4.70)$$

Cette "astuce" de Donéa évite de faire apparaître une dérivée troisième et laisse donc la possibilité d'utiliser tous les éléments, y compris ceux dont les fonctions de forme sont linéaires le long des arêtes (éléments P1, Q1...). Il faut bien noter que, sans cela, l'intérêt de coder les schémas Taylor-Galerkin aurait été grandement diminué, puisque les maillages utilisés dans AVBP n'emploient

que des éléments de ce type !

- Une fois les deux premières opérations réalisées, l'équation (4.69) devient une équation composée uniquement de dérivées spatiales :

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{6} \vec{c} \cdot \vec{\nabla}(\vec{c} \cdot \vec{\nabla})\right) (u^{n+1} - u^n) = -\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u^n + \frac{\Delta t}{2} \vec{c} \cdot \vec{\nabla}(\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u^n) \quad (4.71)$$

Les dérivées spatiales sont alors discrétisées à l'aide de la méthode des éléments finis de Galerkin, comme elle est décrite paragraphe 4.5.4. Ce qui permet d'obtenir l'équation :

$$\left([\mathcal{M}] - \frac{\Delta t^2}{6} [\mathcal{L}]\right) (\{U^{n+1}\} - \{U^n\}) = -\Delta t [\mathcal{K}] \{U^n\} + \frac{\Delta t^2}{2} [\mathcal{L}] \{U^n\} \quad (4.72)$$

où les matrices $[\mathcal{M}]$ et $[\mathcal{K}]$ sont les opérateurs de masse et de rigidité déjà décrits paragraphe 4.5.4. L'opérateur $[\mathcal{L}]$ est une matrice de rigidité relative à la dérivée spatiale d'ordre 2. Sa construction est la suivante :

$$[\mathcal{L}] \{U\}_j = \left\langle \vec{c} \cdot \vec{\nabla}(\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h^n) \middle| \phi_j \right\rangle \quad (4.73)$$

$$= \vec{c} \cdot \int_{\Omega} \vec{\nabla}(\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h^n) \phi_j dV \quad (4.74)$$

$$= \vec{c} \cdot \oint_{\partial\Omega} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h^n) \phi_j \vec{n} dS - \int_{\Omega} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h^n) \vec{\nabla} \phi_j dV \quad (\text{IPP}) \quad (4.75)$$

Et (IPP) signifie intégration par parties. Cette étape primordiale permet de faire disparaître la dérivée seconde et de n'avoir plus que des dérivées premières (ce qui permet d'utiliser éléments P1, Q1...). En introduisant la relation (4.26), on peut exprimer les composantes de $[\mathcal{L}]$ de la même manière que pour $[\mathcal{K}]$ et $[\mathcal{M}]$:

$$\mathcal{L}_{jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \vec{c} \cdot \int_{\partial K_e \cap \partial\Omega} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k) \phi_j \vec{n} dS \quad (4.76)$$

$$- \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \vec{c} \cdot \int_{K_e} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k) \vec{\nabla} \phi_j dV \quad (4.77)$$

Le schéma numérique, ainsi obtenu, est identique au schéma nommé EPG(II) obtenu par Morton et Parrott [152]. Ceci montre un lien de parenté du schéma ETG avec la famille Petrov-Galerkin.

On le verra dans le chapitre suivant, le schéma ETG est précis à l'ordre 3 en espace et en temps. Comparé aux schémas LW ou au schéma centré du second ordre, l'erreur de dispersion qui lui est associée est beaucoup plus faible, ce qui le rend bien plus performant.

L'équation (4.72) reste assez simple, dans le cas présent, mais on note quelques défauts à ce schéma concernant le membre de gauche et la stabilité :

1. Dans le membre de gauche de (4.72), l'expression du terme $-\frac{\Delta t^2}{6} [\mathcal{L}]$ est beaucoup plus complexe dans les cas non-linéaires, faisant apparaître, entre autres, des dérivées temporelles de matrice jacobienne des flux [219] et de plus :
2. ce terme doit être recalculé à chaque itération : $[\mathcal{M}]$ est constante mais pas $-\frac{\Delta t^2}{6} [\mathcal{L}]$.
3. Le domaine de stabilité se réduit lorsque le problème devient multidimensionnel. Il est alors plus réduit que celui du schéma LW *cell-vertex* (en 2D ou 3D), bien que plus large que celui du schéma LW éléments finis [63].

Pour ces raisons, le schéma ETG n'est pas le meilleur candidat pour être adapté à la discrétisation des équations d'Euler. En revanche, il faut garder à l'esprit qu'il est très performant, tant qu'il s'agit de l'équation de convection d'un scalaire, car son coût reste raisonnable (une seule étape), compte tenu de l'amélioration sensible des résultats.

4.6.2 Famille des schémas *Two-Step Taylor Galerkin* (TTG) - Système d'équations de conservation

Présentation

Les défauts non négligeables du schéma ETG dans le cadre des équations d'Euler (sauf si on s'autorise une décomposition en ondes caractéristiques) ont poussé Selmin et Quartapelle [219, 183] à développer des schémas TG à deux étapes. Selmin [219] présente clairement le développement du schéma appelé alors LWTG-(2s) (2s pour *Two steps*) et des améliorations conséquentes qu'il apporte en comparaison de ETG. Colin et Rudgyard [47] ont écrit une formulation générale de cette famille de schémas lors de l'écriture des schémas TTGC. On va présenter ce développement. Il s'agit d'une formulation de type prédicteur-correcteur à six paramètres. Les trois étapes présentées section 4.6.1 sont toujours appliquées. La différence majeure vient de la partie 'développement de Taylor'. En effet, celui-ci est réalisé en deux étapes et s'écrit de la manière suivante :

$$\tilde{u}^n = u^n + \alpha \Delta t \frac{\partial u^n}{\partial t} + \beta \Delta t^2 \frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} \quad (4.78)$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\theta_1 \frac{\partial u^n}{\partial t} + \theta_2 \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial t} \right) + \Delta t^2 \left(\epsilon_1 \frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} + \epsilon_2 \frac{\partial^2 \tilde{u}^n}{\partial t^2} \right) \quad (4.79)$$

On voit, dès lors, que l'astuce introduite par Donéa pour exprimer la dérivée temporelle d'ordre 3 a disparu. En effet, celle-ci est à double tranchant. Certes, dans le cas de l'équation de convection linéaire, l'équation (4.70) permet l'utilisation des fonctions de forme linéaires, mais elle est aussi responsable de la présence du terme $-\frac{\Delta t^2}{6}[\mathcal{L}]$, si difficile à exprimer, dès que l'équation devient non linéaire.

Les schémas TTG sont précis au plus à l'ordre 4 en temps (et 3 en espace avec des fonctions de forme linéaires). Il convient ici de noter que Safjan et Oden [205] ont démontré qu'il est possible de généraliser et de construire des schémas à s étapes, précis à l'ordre $2s$ et inconditionnellement instables. Mais, pour ce faire, ils utilisent des éléments finis h - p , ce qui rend le problème particulièrement complexe et coûteux.

Le tableau 4.1 rappelle les valeurs des coefficients permettant de retrouver les schémas décrits dans la littérature. On précise ici que le choix du coefficient γ apparaissant dans le tableau 4.1 est le plus souvent fixé à $\gamma = 0.01$, comme préconisé par Colin et Rudgyard, pour réaliser des simulations aux grandes échelles. Des commentaires, quant à la performance des schémas TTG, seront faits au chapitre 5.

Là encore, ces schémas présentent une erreur de dispersion beaucoup plus faible que les schémas du second ordre. On le verra par la suite aussi, le fait d'utiliser deux étapes agrandit sensiblement la taille du domaine de stabilité du schéma, en particulier lorsque le problème est multi-dimensionnel.

Schémas	α	β	θ_1	θ_2	ϵ_1	ϵ_2
LW (1 étape)	0	0	1	0	1/2	0
TTG3	1/3	1/9	1	0	0	1/2
TTG4A	1/3	1/12	1	0	0	1/2
TTG4B	0.1409714	0.1160538	0	1	0	0.3590284
TTGC(γ)	1/2 - γ	1/6	0	1	γ	0

TAB. 4.1 - Famille des schémas TTG et les différents coefficients à utiliser pour les obtenir

Ecriture pour les équations d'Euler

On ne présente pas l'écriture de ces schémas pour l'équation de convection linéaire. En effet, celle-ci reste extrêmement proche de ce qui a été présenté dans les sections 4.5.4 et 4.6.1.

La dérivation temporelle étant réalisée, il faut appliquer la deuxième étape de la méthode de Donéa, qui consiste à utiliser l'équation (4.5) pour remplacer les dérivées temporelles par des dérivées spatiales, ce qui donne [47] :

$$\tilde{\mathbf{U}}^n = \mathbf{U}^n - \alpha \Delta t \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^n + \beta \Delta t^2 \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^n \right) \quad (4.80)$$

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n - \Delta t \vec{\nabla} \cdot \left(\theta_1 \vec{\mathcal{F}}^n + \theta_2 \vec{\tilde{\mathcal{F}}}^n \right) + \Delta t^2 \left(\epsilon_1 \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^n \right) + \epsilon_2 \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\tilde{\mathcal{F}}}^n \right) \right) \quad (4.81)$$

L'étape suivante consiste donc à appliquer la méthode de Galerkin aux équations (4.80)-(4.81) et on obtient ¹³ :

$$\int_{\Omega} \delta \tilde{\mathbf{U}}_h^n \phi_j d\mathcal{V} = -\alpha \Delta t \mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) + \beta \Delta t^2 \mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) \quad (4.82)$$

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{U}_h^{n+1} \phi_j d\mathcal{V} = -\Delta t \left(\theta_1 \mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) + \theta_2 \mathbf{L}_j(\tilde{\mathbf{U}}_h^n) \right) + \Delta t^2 \left(\epsilon_1 \mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) + \epsilon_2 \mathbf{LL}_j(\tilde{\mathbf{U}}_h^n) \right) \quad (4.83)$$

avec :

$$\delta \tilde{\mathbf{U}}_h^n = \tilde{\mathbf{U}}_h^n - \mathbf{U}_h^n \quad (4.84)$$

$$\delta \mathbf{U}_h^{n+1} = \mathbf{U}_h^{n+1} - \mathbf{U}_h^n \quad (4.85)$$

$$\mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) = \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h^n \phi_j d\mathcal{V} \quad (4.86)$$

$$\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) = \oint_{\partial\Omega} \phi_j \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h^n \right) \cdot \vec{n} d\mathcal{S} - \int_{\Omega} \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h^n \right) \cdot \vec{\nabla} \phi_j d\mathcal{V} \quad (4.87)$$

On rappelle que les deux termes de $\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n)$ sont obtenus suite à une intégration par parties (voir l'écriture du schéma TTG et l'équation (4.75))

¹³On reprend ici les notations utilisées dans [47] pour exprimer les opérateurs spatiaux.

Comme on l'a évoqué paragraphe 4.5.6, on va appliquer l'approche *éléments finis de groupe* de Fletcher (Colin et Rudgyard évoquent l'*approximation des produits des variables*), ce qui veut dire qu'on suppose à la fois (4.26) et (4.54). La méthodologie reste la même que dans les paragraphes précédents, donc on obtient directement :

$$\mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k^n \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k \phi_j d\mathcal{V} \quad (4.88)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) &= \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \vec{\mathcal{A}}_e^n \cdot \sum_{k \in K_e} \int_{\partial K_e \cap \partial \Omega} \left(\vec{\mathcal{F}}_k^n \cdot \vec{\nabla} \phi_k \right) \phi_j \vec{n} d\mathcal{S} \\ &- \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \vec{\mathcal{A}}_e^n \cdot \sum_{k \in K_e} \int_{K_e} \left(\vec{\mathcal{F}}_k^n \cdot \vec{\nabla} \phi_k \right) \vec{\nabla} \phi_j d\mathcal{V} \end{aligned} \quad (4.89)$$

Sous forme matricielle, on a finalement en utilisant les notations précédemment décrites (et $w_j = \phi_j$) :

$$[\mathcal{M}]\{\delta \tilde{\mathbf{U}}^n\} = -\alpha \Delta t \{\mathbf{L}(\mathbf{U}^n)\} + \beta \Delta^2 \{\mathbf{LL}(\tilde{\mathbf{U}}^n)\} \quad (4.90)$$

$$\begin{aligned} [\mathcal{M}]\{\delta \mathbf{U}^{n+1}\} &= -\Delta t \left(\theta_1 \{\mathbf{L}(\mathbf{U}^n)\} + \theta_2 \{\mathbf{L}(\tilde{\mathbf{U}}^n)\} \right) \\ &+ \Delta t^2 \left(\epsilon_1 \{\mathbf{LL}(\mathbf{U}^n)\} + \epsilon_2 \{\mathbf{LL}(\tilde{\mathbf{U}}^n)\} \right) \end{aligned} \quad (4.91)$$

Dans les équations (4.88) et (4.89), le choix de $\mathcal{T}_h$ n'est pas encore arrêté. Les éléments K_e peuvent être linéaires, bilinéaires ou trilineaires. En plus de l'approche *éléments finis de groupe*, une hypothèse est réalisée pour le calcul de la matrice jacobienne. Comme pour le schéma LW *cell-vertex*, on la considère comme constante au sein de la cellule, ce qui a permis de sortir $\vec{\mathcal{A}}$ des intégrales et d'utiliser sa moyenne sur chaque élément.

Inversion de la matrice de masse

Une particularité des expressions (4.48), (4.72), (4.90) et (4.91), due à la méthode des éléments finis, est qu'elles sont implicites. Lorsque la matrice de masse n'est pas condensée, les schémas éléments finis sont implicites (en espace). La conséquence évidente est qu'il faut donc réaliser une inversion de la matrice $\{\mathcal{M}\}$. Le problème vient évidemment du fait qu'une telle opération est très coûteuse (en temps de calcul mais aussi en mémoire), si elle est faite de manière exacte. Mieux vaut donc avoir recours à une méthode itérative d'inversion. La matrice $\{\mathcal{M}\}$ étant définie positive et à diagonale dominante, on peut utiliser la méthode de Jacobi pour l'inverser (voir annexe B). Cependant, l'algorithme de Jacobi peut s'avérer très coûteux. Donéa [62] a néanmoins montré que deux itérations de la méthode suffisent pour obtenir un résultat, dont la qualité (en particulier d'un point de vue erreur de dispersion) reste très proche du schéma d'origine et dont la convergence en maillage reste la même (c'est-à-dire en $\mathcal{O}(h^3)$). Colin et Rudgyard [47] ont d'ailleurs confirmé ce résultat pour le schéma TTGC. Au final, on se retrouve donc avec des schémas très performants et dont le coût reste raisonnable (voir tableau (4.6.2)).

Schéma	Temps de calcul
<i>LW</i>	1
<i>TTG4A</i>	1,9
<i>TTGC(0.01)</i>	1,9
<i>GRK</i>	2,5

TAB. 4.2 - Temps de calcul avec différents schémas d'AVBP en prenant le schéma LW comme référence.

4.6.3 Implantation dans AVBP

Eléments linéaires

Dans le cas des éléments P1, l'écriture des schémas TTG dans AVBP est facilitée une fois que le schéma LW *cell-vertex* est lui-même codé, car les opérateurs utilisés sont les mêmes. Le cas du terme $\mathbf{L}_j$ a déjà été évoqué paragraphe 4.5.6 et on a la relation (4.64), ce qui correspond au premier terme de (4.24).

Il reste à expliciter le terme $\mathbf{LL}_j$. On va considérer ici qu'on se trouve au centre du domaine. Le cas des termes sur le bord $\partial\Omega$ sera longuement discuté plus tard. Il reste donc :

$$\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) = - \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \vec{\mathcal{A}}_e^n \cdot \sum_{k \in K_e} \int_{K_e} \left(\vec{\mathcal{F}}_k^n \cdot \vec{\nabla} \phi_k \right) \vec{\nabla} \phi_j d\mathcal{V} \quad (4.92)$$

$$= - \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \vec{\mathcal{A}}_e^n \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_j d\mathcal{V} \left(\sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k^n \cdot \vec{\nabla} \phi_k \right) \quad (4.93)$$

$$= \frac{1}{d} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} (\vec{\mathcal{A}}_e \mathbf{R}_e)^n \cdot \vec{S}_e \quad (4.94)$$

Eléments bi- et trinéaires / Maillages mobiles

Dans le cas des éléments non linéaires, il n'est plus possible de considérer les gradients des fonctions de forme comme étant constants sur chaque cellule. La relation (4.41) n'est donc plus valable et les calculs des vecteurs $\mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n)$ et $\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n)$ sont plus complexes. Théoriquement, on pourrait faire appel à des formules de quadratures classiques pour calculer les intégrales, mais cette alternative reste coûteuse et limite très fortement l'intérêt d'utiliser un maillage hybride. Pour pallier à ce problème de coût, Colin et Rudgyard [47] ont adopté une méthodologie originale qui consiste à calculer les intégrales comme dans le cas des éléments linéaires (en considérant les gradients et divergences des flux constants dans un élément), puis ajouter un terme de correction pour prendre en compte le caractère bi- ou trilaire de l'élément. Le gain de temps de calcul est alors non négligeable, pour une perte de précision minimale. On a donc :

$$\mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) = \mathbf{L}_j^{lin}(\mathbf{U}_h^n) + \delta \mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) \quad (4.95)$$

$$\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) = \mathbf{LL}_j^{lin}(\mathbf{U}_h^n) + \delta \mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) \quad (4.96)$$

La description du calcul complet est donnée dans [47]. Sur des éléments réguliers, leur méthode

permet d'obtenir une intégration exacte. D'après les tests réalisés dans [47], il semble, en effet, que la précision ne soit pas fortement affectée lorsque le maillage devient quelconque. On notera, finalement, que la formulation approchée a été construite de façon à respecter la conservation discrète des grandeurs transportées. Enfin, bien qu'on n'ait pas utilisé cette spécificité dans cette thèse, il faut noter qu'il existe une version du schéma TTGC (ainsi que des schémas *cell-vertex* CV et LW) pour les maillages mobiles basée sur la formulation ALE (*Arbitrary Lagrangian-Eulerian*), développée et intégrée dans AVBP par Moureau et al [156].

4.7 Schémas de convection pour la partie diphasique

Les schémas de convection *cell-vertex* (différences centrées et LW) présentent de nombreuses qualités et, en particulier, leur robustesse face aux maillages irréguliers, hybrides et distordus. Néanmoins, si leur précision peut s'avérer suffisante pour des LES d'écoulements gazeux, principalement non réactifs, dans des géométries complexes [210, 216], certains calculs académiques ont montré leurs limites [47]. Les schémas TG implantés dans AVBP par Colin et Rudgyard peuvent être vus comme une extension du schéma LW, du fait du lien étroit qui existe entre éléments finis et méthode *cell-vertex* sur les éléments P1. Grâce à leur très faible erreur de dispersion, ces schémas fournissent de bien meilleurs résultats sur tous les cas tests classiques, comme on va le voir dans le chapitre suivant et ont montré leur réelle supériorité sur des configurations académiques [47] et sur des calculs réactifs monophasiques [180].

Comme on l'a mentionné précédemment, les équations permettant de décrire la phase dispersée sont d'une nature beaucoup plus "capricieuse" que les équations de Navier-Stokes. En effet, si le mouvement décorrélé est négligé, alors il n'y a ni terme de pression, ni terme diffusif. Dès lors, assurer la stabilité des calculs menés avec les schémas *cell-vertex* pour résoudre les deux phases, en particulier en géométrie complexe est une tâche très ardue et l'emploi de viscosité artificielle, qu'on décrit plus loin (section 4.11), est absolument indispensable [109, 170, 21] et parfois malheureusement insuffisant [109, 192]. Riber [192] a montré sur des THI que l'emploi des schémas TG avec un senseur de viscosité modifié permet de remédier, en grande partie, au problème, au moins sur des géométries simples. De ce fait, les calculs sur géométries complexes réalisés dans cette thèse, ainsi que d'autres calculs réalisés pendant la même période [117], sont tous basés sur cette stratégie. Toutefois, compte tenu de la nature hyperbolique des équations qu'on veut résoudre, des phénomènes rencontrés ("clusters" de particules assimilables à des chocs) [109, 146] et des choix faits par d'autres équipes résolvant des équations similaires (on pense, par exemple, à la méthode DQMOM [61]), le choix des schémas amont pourrait s'avérer payant à l'avenir, en terme de robustesse comme en précision, d'où l'intérêt porté dans cette thèse sur les schémas *fluctuation splitting*.

Ces derniers schémas ont été implantés et testés dans le code AVBP pour la convection d'un scalaire. Les résultats obtenus sont présentés dans le chapitre suivant. Compte tenu de l'absence d'inversion de la matrice de masse pour ces schémas, il n'est pas étonnant d'obtenir une précision d'ordre 1 et une diffusion numérique importante. Il faut, toutefois, noter que cette diffusion n'a lieu que dans le sens de propagation des ondes (contrairement à la viscosité artificielle qui agit dans toutes les directions). Ce point reste, néanmoins, à améliorer mais le potentiel de ces méthodes est indiscutable. L'ajout de la matrice de masse dans l'écriture des schémas distributifs permettrait une amélioration considérable de leur précision des schémas [103] mais au dépend de certaines propriétés importantes (comme la positivité, notamment). Une piste intéressante repose sur les extensions FCT (pour *flux corrected transport*

[263, 165]) pour les schémas distributifs. Celles-ci ont été développées par Hubbard et Roe [103, 104] et implantées¹⁴ dans AVBP pendant cette thèse. Bien qu'il semble que, d'un point de vue théorique, les méthodes FCT ne soient pas totalement satisfaisantes [143], les premiers résultats obtenus sont très encourageants. Il reste néanmoins à travailler sur l'adaptation de ces méthodes au système hyperbolique décrivant la phase dispersée, ce qui s'avère être une tâche ardue.

Enfin, pour simuler les écoulements instationnaires, on note que des extensions naturelles des schémas stationnaires sont développées au VKI et à Bordeaux [143, 194, 5] en introduisant des éléments spatiaux-temporels, afin d'obtenir, à la fois, la précision désirée et maintenir (en théorie et en pratique) les propriétés précédemment mentionnées des schémas stationnaires. Le seul inconvénient (dans le cadre d'AVBP) serait alors d'impliciter la discrétisation temporelle, ce qui n'est pas, pour l'instant, envisagé¹⁵.

4.8 Termes de diffusion

Dans cette partie, on va présenter les termes de diffusion utilisés dans AVBP. Il existe deux opérateurs différents. Le premier résulte de la formulation *cell-vertex* appliquée aux termes visqueux. Le second est une adaptation de la méthode éléments finis de Galerkin au code AVBP.

4.8.1 Opérateur *cell-vertex* (4Δ)

Cet opérateur correspond historiquement au premier implanté dans AVBP pour calculer la partie diffusive des équations de Navier-Stokes. La méthode de calcul suit exactement la description du calcul du résidu à la cellule (section 4.3), ainsi que la formule de l'équation nodale (4.12), pour obtenir le terme de diffusion au noeud j . Il reste donc à expliciter le calcul du flux diffusif ou plus précisément celui du gradient du vecteur solution.

Calcul du gradient

Le calcul du gradient du vecteur est basé sur l'hypothèse que le vecteur solution varie linéairement le long des arêtes, à la manière des flux, ce qui revient à écrire (4.26) et donc faire une approximation du produit des variables, comme on l'a expliqué section (4.5.5). Ce calcul est présenté par Crumpton et al. dans [55]. Selon ces auteurs, cette façon d'intégrer les flux diffusifs comme les flux convectifs est plus naturelle et consistante que de faire intervenir un volume de contrôle différent pour chaque phénomène. Le calcul du gradient au centre d'une cellule se fait de la même manière que le calcul de la divergence des flux (4.10) en écrivant que (dans le cas 3D) :

$$\vec{\nabla} \varphi = \vec{\nabla} \cdot (\varphi \vec{e}_x) \vec{e}_x + \vec{\nabla} \cdot (\varphi \vec{e}_y) \vec{e}_y + \vec{\nabla} \cdot (\varphi \vec{e}_z) \vec{e}_z \quad (4.97)$$

¹⁴ Avec l'aide précieuse d'Anthony Roux !

¹⁵ Le passage à une implication en temps nécessiterait de changer sensiblement le code.

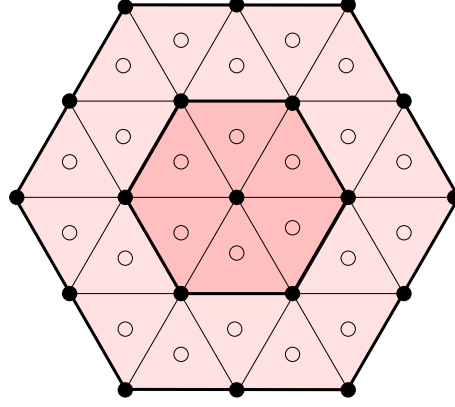


FIG. 4.14 - Noeuds et cellules utilisés pour le calcul du terme de diffusion $\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_j^V$ avec l'opérateur 4Δ au noeud situé au centre. Au centre des cellules sombres sont calculés les gradients $(\vec{\nabla}\mathbf{U})_e$ et termes de diffusion $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V)_e$ utilisés dans le calcul. Au centre des cellules claires sont calculés les gradients $(\vec{\nabla}\mathbf{U})_e$.

où φ est une variable scalaire quelconque. On a donc :

$$(\vec{\nabla}\mathbf{U})_e = -\frac{1}{dV_e} \sum_{k \in K_e} \mathbf{U}_k \vec{S}_k \quad (4.98)$$

Une fois le gradient à la cellule calculé, quel que soit le type d'élément considéré, le gradient est reconstruit au noeud j via une moyenne similaire à la formule (4.12) (opération *scatter*) :

$$(\vec{\nabla}\mathbf{U})_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{V_e}{n_v^e} (\vec{\nabla}\mathbf{U})_e \quad (4.99)$$

Divergence des flux

Les flux diffusifs sont calculés à partir des gradients aux noeuds :

$$\vec{\mathcal{F}}_j^V = \vec{\mathcal{F}}_h^V(\vec{x}_j) = \vec{\mathcal{F}}^V(\mathbf{U}_j, (\vec{\nabla}\mathbf{U})_j)$$

La divergence des flux diffusifs aux noeuds (résidu des flux diffusifs) est obtenue, en suivant la méthodologie décrite section (4.3), en appliquant consécutivement (4.10) puis (4.12), à l'instar des flux convectifs, mais toujours avec $\mathbf{D}_{j,e} = \frac{1}{n_v^e} \mathbf{Id}$, c'est-à-dire la matrice des différences centrées. Cela implique donc que les gradients varient linéairement le long des arêtes des cellules. Cette approximation ne pose pas de difficultés pratiques et le schéma est consistant et d'ordre 2.

Pour obtenir le terme de diffusion au noeud j , il faut donc procéder à deux opérations *scatter* (la première pour les gradients, la deuxième pour distribuer les résidus), ce qui rend le calcul du terme de diffusion coûteux. Cela revient aussi à dire que le *stencil* de ce schéma de diffusion est à 4Δ , c'est-à-dire que deux couches de cellules autour du noeud j sont exploitées pour le calcul (voir figure (4.14)).

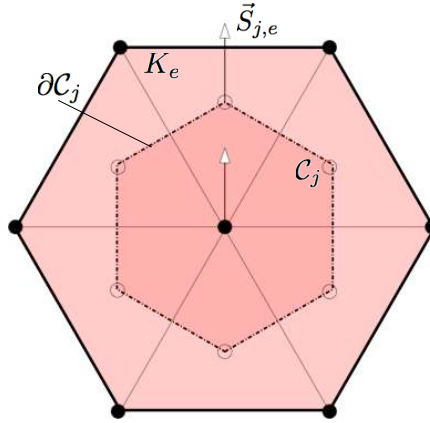


FIG. 4.15 - Noeuds et cellules utilisés pour le calcul du terme de diffusion $\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_j^V$ avec l'opérateur 2Δ au noeud situé au centre. Au centre des cellules sont calculés les flux $(\vec{\nabla} \mathbf{U})_e$.

En plus de son coût, ce schéma a pour défaut d'être très peu dissipatif (moins que l'opérateur qu'il approxime), en particulier pour les petites échelles. Son utilisation, dans le cadre de simulations d'écoulements turbulents instationnaires (LES), est donc plutôt déconseillée car les petites structures ne sont pas dissipées et les spectres d'énergie cinétique erronés (voir les THI dans [45]). En outre, cet opérateur ne dissipe absolument pas les *wiggles* dont la longueur d'onde est égale à 2Δ (ou $2h$), c'est-à-dire les oscillations numériques de plus petite longueur, présentes dans toute simulation numérique (mais d'une manière plus ou moins sensible) et souvent génératrices de divergence des résultats.

4.8.2 Opérateur (2Δ) - Méthode de Galerkin

Au vu des limitations de l'opérateur 4Δ , un deuxième opérateur a vu le jour dans AVBP. Celui-ci est basé sur la méthode de Galerkin. Il a été montré que l'opérateur de diffusion ainsi obtenu peut être exprimé comme un schéma *fluctuation splitting* (donc *cell-vertex*) sur des éléments linéaires [246]. Cependant, à proprement parler, il ne s'agit pas d'un schéma *cell-vertex* mais *vertex-centred* comme on va le voir.

Comme l'a indiqué Colin [45], la construction du schéma 2Δ dans AVBP ne s'appuie pas sur une application stricte de la méthode des éléments finis de Galerkin, car la formulation exacte devient alors assez lourde dans certains cas (équation de la quantité de mouvement par exemple). La méthodologie adoptée permet toutefois d'obtenir un résultat similaire.

Le schéma obtenu à partir de la méthode de Galerkin est donc équivalent à un schéma volumes finis *vertex-centred* pour des éléments P1 [14]. Ainsi, le volume de contrôle associé au noeud j n'est pas une cellule primale du maillage. Ici, le calcul de la divergence des flux ne se fait donc pas au centre des cellules comme dans l'équation (4.10)), mais dans le volume de contrôle associé au noeud j , qu'on considère loin des bords ici (figure (4.15)). En utilisant la relation (4.41) :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V \Big|_j &\approx \frac{1}{V_j} \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h^V \phi_j dV = -\frac{1}{V_j} \int_{\Omega} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{\nabla} \phi_j dV \\ &= \frac{1}{V_j} \int_{\partial C_j} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{n} dS \end{aligned} \quad (4.100)$$

La discrétisation de l'équation (4.100) s'écrit alors ¹⁶ :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V \Big|_j = \frac{1}{dV_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \vec{\mathcal{F}}_{j,e}^V \cdot \vec{S}_{j,e} \quad (4.101)$$

où la normale $\vec{S}_{j,e}$ est associée au noeud j , dans la cellule K_e et il reste à expliciter la définition de $\vec{\mathcal{F}}_{j,e}^V$. Dans le cas de l'opérateur de diffusion à 4Δ , aucune distinction n'est faite selon l'élément. Ici, à l'instar des schémas de convection éléments finis, il existe une différence selon qu'on traite des éléments P1 (linéaires) et des éléments bi ou tri-linéaires. Pour des éléments linéaires, les gradients sont constants au sein de chaque cellule (cf. fonctions de forme) donc :

$$\vec{\mathcal{F}}_{j,e}^V = \vec{\mathcal{F}}_e^V = \vec{\mathcal{F}}^V((\vec{\nabla}\mathbf{U})_e).$$

Dans le cas des éléments non linéaires, en revanche, on utilise, pour calculer les flux, des reconstructions éléments finis de Galerkin. Cette reconstruction utilise la même méthodologie que celle évoquée pour les schémas Taylor-Galerkin, section 4.6.3, soit :

$$\vec{\mathcal{F}}_{j,e}^V = \vec{\mathcal{F}}^V((\vec{\nabla}\mathbf{U})_e) + \vec{\mathcal{F}}^V((\delta\vec{\nabla}\mathbf{U})_{j,e}).$$

Au final, la méthode de Galerkin n'est donc pas appliquée à la variable considérée, mais au flux correspondant (construit à partir des gradients de cette variable). Colin [45] a cependant montré que les deux méthodes sont équivalentes, sauf pour des pyramides. On notera que ce développement est très proche de celui fait pour exprimer les dérivées secondes, pour les schémas Taylor-Galerkin.

Cet opérateur ne fait intervenir que les noeuds appartenant aux cellules adjacentes au noeud j . Ainsi, le *stencil* de l'opérateur est de 2Δ et la conséquence principale, par rapport à son vis-à-vis à 4Δ , est qu'il dissipe les petites échelles. Son comportement physique est, dès lors, beaucoup plus physique et il peut être utilisé pour les calculs turbulents, car il évite de voir l'énergie cinétique s'accumuler aux longueurs d'onde inférieures à 4Δ .

Un des défauts principaux de ce schéma vient de son inconsistance sur certaines connectivités [45]. Sur un maillage pour lequel la connectivité des noeuds ne change pas, il n'y a aucun problème. En revanche, dans le cas contraire, la dérivée seconde peut être mal calculée. Néanmoins, en moyenne sur un élément, celle-ci reste exacte, ce qui signifie que la solution globale n'est finalement pas affectée et l'inconsistance est locale.

Cet opérateur est celui utilisé dans les calculs LES de cette thèse.

4.9 Calcul des termes sources

On l'a vu dans les chapitres précédents, les termes sources peuvent permettre de modéliser différents phénomènes physiques : dégagement de chaleur, création ou disparition d'une ou plusieurs espèces, flux radiatifs, évaporation... Leur calcul peut suivre deux méthodes de discrétisation : soit ces termes sont traités par un opérateur volumes finis *vertex-centred*, soit on utilise un opérateur orienté éléments finis, en accord avec la méthode *cell-vertex*.

Quelle que soit la méthode employée, on considérera le terme source comme constant au sein du volume de contrôle sur lequel est réalisé le calcul.

¹⁶On notera que contrairement à ce qui est obtenu dans la formule (4.10), il n'y a pas de signe "-" qui apparaît.

Terme source *vertex-centred*

L'intégration spatiale du terme source se fait à l'endroit de la mise à jour temporelle. On l'a dit précédemment, les variables sont stockées aux noeuds du maillage. Ainsi, l'intégrale relative au terme source $\mathbf{S}$ s'écrit sur le volume de contrôle lié au noeud j , soit :

$$\int_{C_j} \mathbf{S} d\mathcal{V}$$

Etant donné l'hypothèse évoquée au paragraphe précédent, le terme source *vertex-centred* , une fois discrétisé, s'exprime de la manière suivante :

$$\boxed{\int_{C_j} \mathbf{S} d\mathcal{V} = \mathbf{S}_j V_j} \quad (4.102)$$

et $\mathbf{S}_j = \mathbf{S}(\mathbf{U}_j)$ est une valeur calculée directement avec les variables stockées au noeud j .

Cette formulation a pour principal avantage d'être extrêmement simple à coder car faisant intervenir uniquement les variables au lieu où est calculé le terme source. Il faut, en revanche, remarquer qu'en conséquence, elle est aussi assez peu précise et que le terme source peut aussi varier de manière très brusque (ce que l'on essaie de limiter dans une certaine mesure).

Terme source éléments finis

Une manière plus précise de calculer le terme source revient à appliquer la méthode *cell-vertex* (et donc ici la méthode des résidus pondérés avec une projection sur les fonctions de formes éléments finis) au terme source. Une fois de plus, cette opération se fait en deux étapes. Le volume de contrôle est ici la cellule du maillage et on calcule, dans un premier temps, la contribution de cette cellule pour un noeud j lui appartenant :

$$\int_{K_e} \mathbf{S} \phi_j d\mathcal{V} = \frac{\mathbf{S}_e V_e}{n_v^e} \quad (4.103)$$

et ici, $\mathbf{S}_e = \mathbf{S}(\bar{\mathbf{U}}_e)$ est calculé avec la moyenne des variables prises au centre de la cellule $\bar{\mathbf{U}}_e = \sum_{k \in K_e} \mathbf{U}_k / n_v^e$. Une fois calculées, les contributions sont sommées au noeud j :

$$\int_{\Omega} \mathbf{S} \phi_j d\mathcal{V} = \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{\mathbf{S}_e V_e}{n_v^e} \quad (4.104)$$

Cette formulation est certes plus lourde à mettre en place et plus coûteuse (on fait appel à l'opération *scatter*). Elle est aussi plus précise que la précédente et c'est en général la méthode adoptée dans AVBP. Enfin, on peut faire remarquer que, dans l'esprit, la première formulation correspond aux méthodes *cell-centre* et *vertex-centred* , alors que la seconde est relative à la méthode *cell-vertex* , ce qui montre là encore l'intérêt des schémas *cell-vertex* en terme de précision [60].

4.10 Discrétisation temporelle

Dans cette partie, on s'intéresse à la façon dont s'exprime la mise à jour temporelle notée $\delta \mathbf{U}_j$ dans :

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n + \Delta t \delta \mathbf{U}_j^n, \quad (4.105)$$

ainsi qu'au calcul de Δt .

4.10.1 Avancements temporels

Trois méthodes d'avancement temporel existent dans AVBP. Toutes sont explicites et très communément appliquées dans le monde de la CFD. La première a déjà été évoquée, il s'agit de la discrétisation totale suivant la méthodologie de Lax et Wendroff [119]. Elle est basée sur un développement en série de Taylor en temps, dans lequel les dérivées temporelles sont remplacées par des dérivées spatiales de même ordre (voir section 4.4.2). On peut alors exprimer facilement la mise à jour temporelle et celle-ci s'écrit :

$$\delta \mathbf{U}_j^n = -\mathbf{N}_j^{n,LW} \quad (4.106)$$

La seconde n'est qu'une variante de la première, mais en deux étapes. Il s'agit de la discrétisation totale suivant la méthode Taylor-Galerkin à 2 étapes (schémas TTG) . On peut l'écrire de manière synthétique :

$$\begin{cases} \sum_k \mathcal{M}_{jk} \delta \tilde{\mathbf{U}}_j^n = -\tilde{\mathbf{N}}_j^{n,TTG} V_j & (prediction) \\ \sum_k \mathcal{M}_{jk} \delta \mathbf{U}_j^n = -\mathbf{N}_j^{n,TTG} V_j & (correction) \end{cases} \quad (4.107)$$

où $\tilde{\mathbf{N}}_j^{n,TTG}$ et $\mathbf{N}_j^{n,TTG}$ sont calculés à partir des équations (4.90) et (4.91) respectivement et $\mathcal{M}_{jk}$ sont les composantes de la j -ième ligne de la matrice de masse.

La troisième méthode d'avancement en temps est différente des deux premières. Il s'agit d'une intégration de type Runge-Kutta. Ici, la séparation entre discrétisations spatiale et temporelle est franche. Il s'agit d'une méthode des lignes dont le but est de résoudre l'équation aux dérivées ordinaires (4.13). La forme générale de la méthode de Runge-Kutta à M étapes est la suivante [100]¹⁷ :

¹⁷On fait abstraction de l'indexage spatial ici pour alléger les notations

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}^{(1)} &= \mathbf{U}^n \\
\mathbf{U}^{(2)} &= \mathbf{U}^n - \Delta t \alpha_2 \mathbf{N}^{(1)} \\
\mathbf{U}^{(3)} &= \mathbf{U}^n - \Delta t \alpha_3 \mathbf{N}^{(2)} \\
&\vdots \\
\mathbf{U}^{(M)} &= \mathbf{U}^n - \Delta t \alpha_M \mathbf{N}^{(M-1)} \\
\mathbf{U}^{n+1} &= \mathbf{U}^n - \Delta t \sum_{p=1}^M \beta_p \mathbf{N}^{(p)}
\end{aligned} \tag{4.108}$$

et pour assurer la consistance de la formule : $\sum_{p=1}^M \beta_p = 1$. Par ailleurs, il faut noter ici que $\mathbf{N}^{(p)}$ signifie : $\mathbf{N}^{(p)} = \mathbf{N}(\mathbf{U}^{(p)})$. Il existe un très grand nombre de combinaisons possibles. Les plus connues sont le schéma prédictor-correcteur de Heun et le schéma Runge-Kutta 4 employé par Jameson et al. [100, 107, 184]). Dans AVBP, la version utilisée est, à l'instar de NTMIX [18], le schéma Runge-Kutta à faible stockage, en général à 3 étapes (bien qu'on puisse l'utiliser avec 1 à 5 étapes). Le principe est de n'utiliser à la dernière étape (4.108) que l'opérateur calculé avec la solution de l'étape précédente (seul le coefficient β_M est non-nul et égal à 1 et on a : $\beta_M = \alpha_{M+1}$). Ainsi ne sont stockées que la solution au pas de temps n et la solution intermédiaire. Les coefficients pour les schémas utilisables dans AVBP sont résumés dans le tableau (4.3)¹⁸.

Schémas (M étapes)	α_2	α_3	α_4	α_5	β_M	Commentaires
1 (Euler)	0	0	0	0	1	instable avec un schéma centré
2 (Heun)	1/2	0	0	0	1	instable avec un schéma centré
3	1/3	1/2	0	0	1	cond. stable avec un schéma centré
4	1/4	1/3	1/2	0	1	cond. stable avec un schéma centré
5	1/5	1/4	1/3	1/2	1	cond. stable avec un schéma centré

TAB. 4.3 - Coefficients α_p utilisés pour les différents schémas Runge-Kutta à faible stockage dans AVBP.

Jusqu'à présent, on ne considérait pas le schéma d'intégration spatiale, seule la dépendance en temps de la solution $\mathbf{U}$ était prise en compte. Le choix du pas de temps est néanmoins primordial pour garantir la stabilité de la méthode numérique.

4.10.2 Calcul du pas de temps

Un des paramètres les plus importants dans une simulation numérique (instationnaire !) est le pas de temps Δt . Celui-ci a un impact considérable sur la stabilité du calcul et sa précision. L'utilisateur peut le fixer mais, en général, la méthode numérique employée n'étant jamais inconditionnellement stable dans AVBP, on préfère fixer d'autres paramètres permettant de calculer le pas de temps, de façon à assurer (en théorie, au moins) la stabilité de la simulation. Ces paramètres sont les nombres de Courant et de Fourier, entre autres.

¹⁸Il faut noter que les coefficients proposés correspondent aux coefficients permettant d'obtenir la série de Taylor en temps de $\mathbf{U}$ d'ordre le plus élevé. Un grand nombre de combinaisons existe en réalité, on peut en effet chercher à augmenter le domaine de stabilité plutôt que la précision. Le schéma RK3, par exemple, est souvent utilisé avec un coefficient α_2 égal à 1/2, plutôt que 1/3 pour améliorer la stabilité du schéma complet obtenu.

CFL

Le CFL ou nombre de CFL (pour Courant-Friedrichs-Lewy) qu'on notera ν est un paramètre permettant d'assurer la stabilité du schéma numérique de **convection**. La condition CFL est alors simplement définie par :

$$\boxed{\nu \leq \nu_c} \quad (4.109)$$

où ν_c est la valeur limite assurant la convergence L^2 de la méthode numérique considérée. On choisit alors Δt de façon à respecter cette condition. Dans un cas monodimensionnel (maillage régulier...), la formulation discrète d'une équation du même type que (4.25) fait apparaître le pas de temps et le pas d'espace h . Le CFL s'écrit alors :

$$\nu = \frac{c\Delta t}{h}.$$

Dans le cas d'un schéma multidimensionnel et d'un système d'équations hyperboliques, il s'avère plus difficile d'exprimer le pas de temps à partir du CFL. La stabilité de la discrétisation du système d'équation (4.5) est assurée si, et seulement si, la condition de stabilité du schéma numérique est respectée pour la grandeur caractéristique se propageant le plus vite. Cette vitesse caractéristique est obtenue en calculant le rayon spectral ρ de la Jacobienne des flux. Dans le cas des équations d'Euler monodimensionnelles (avec la vitesse de convection $u > 0$), il est égal à :

$$\rho(\mathbf{A}) = u + c,$$

avec ici $\mathbf{A}$ la Jacobienne et c la vitesse du son. La grandeur caractéristique associée ici est l'onde acoustique se propageant dans le sens de l'écoulement. Lorsque u et c varient, le calcul du pas de temps est réalisé sur tous les volumes de contrôle et on choisit alors la plus petite valeur obtenue sur l'ensemble du domaine de calcul.

Le passage à une dimension $d > 1$ complexifie encore le calcul bien que le principe soit toujours le même. Dans AVBP, le pas de temps (à partir du schéma de convection) pour une cellule K_e est donné par :

$$\boxed{\Delta t_e^C = \nu \frac{V_e}{\sqrt{\sum_{k \in K_e} (\lambda_k^{(max)})^2}}} \quad (4.110)$$

avec $\lambda_k^{(max)}$ le rayon spectral de la matrice :

$$\frac{1}{d} \vec{\mathcal{A}}_e \cdot \vec{S}_k.$$

Au final, le pas de temps utilisé est :

$$\Delta t^C = \min_{e \in \mathcal{T}_h} (\Delta t_e^C).$$

Les limites de stabilité (fournies par ν_c) seront évoquées pour des cas mono- et bidimensionnels dans le chapitre suivant.

Nombre de Fourier

Le nombre de Fourier F est le pendant du nombre CFL pour la diffusion. Son calcul repose globalement sur les mêmes idées que le CFL [234], c'est à dire qu'on détermine le pas de temps de façon à assurer :

$$\boxed{F \leq F_c} \quad (4.111)$$

Dans un calcul monodimensionnel, sa définition est la suivante :

$$F = \frac{D\Delta t}{h^2},$$

où D est un coefficient de diffusion. Dans AVBP, le pas de temps à la cellule K_e est donné par :

$$\boxed{\Delta t_e^V = \frac{F\Delta^2}{D}} \quad (4.112)$$

où D est un coefficient de diffusion (proportionnel à la viscosité cinématique) et Δ est une longueur de référence définie ici par :

$$\Delta^2 = \frac{2V_e}{\frac{1}{d^2} \sum_{k \in K_e} S_k^2}.$$

Là aussi, le pas de temps utilisé pour le calcul est le plus petit déterminé sur l'ensemble du domaine de calcul, soit :

$$\Delta t^V = \min_{e \in \mathcal{T}_h} (\Delta t_e^V).$$

Dans cette thèse, on s'intéresse surtout aux schémas de convection, donc on n'évoquera pas les limites de stabilité du schéma de diffusion dans les chapitres qui suivent. Il faut cependant retenir que la condition de stabilité du schéma 2Δ sur des maillages réguliers en 1D, avec une intégration temporelle d'Euler (explicite), est $F_c = \frac{1}{2}$.

Termes sources d'espèces chimiques

Il existe une condition de plus intégrée dans le calcul du pas de temps. Celle-ci est liée à la présence des termes sources et n'est pas en soi un critère de stabilité. Les termes sources (prenons l'exemple des termes $\dot{\omega}$ de la chimie) sont parfois des fonctions très raides du temps et non linéaires. Si le pas de temps est trop grand, on peut se trouver dans une situation où une fraction massique devient négative ou supérieure à 1. En soi, cela n'entraîne pas forcément une divergence du calcul. Cependant, la physique interdit ce genre de valeur et pour les éviter, un calcul de pas de temps "chimique" est réalisé dans AVBP. Celui-ci s'écrit :

$$\Delta t^{source} = \chi \min_j (\min_{spec} \Delta t_j^{spec})$$

où χ est le seuil fixé par l'utilisateur en fonction de la chimie utilisée pour la simulation et Δt_j^{spec} est le pas de temps calculé au noeud j pour une espèce chimique donnée. Ce pas de temps est déterminé de la façon suivante :

$$\Delta t_j^{spec} = \frac{\rho_j}{|\dot{\omega}_j^{spec}|}$$

Au final, le pas de temps utilisé pour un calcul d'écoulement réactif dans AVBP est :

$$\Delta t = \min(\Delta t^C, \Delta t^V, \Delta t^{source})$$

Le choix du seuil χ est délicat. χ représente grossièrement la variation relative de ρ_j due à la réaction pendant un pas de temps. Si χ dépasse 0, 1, des problèmes sont à attendre en général (voir, par exemple, le livre de Oran et Boris [165] sur l'intégration des systèmes d'EDO avec termes sources).

4.11 Viscosité artificielle

Les opérateurs de convection utilisés dans AVBP sont centrés en espace. Ceux-ci, on le verra par la suite, ont des difficultés à transporter les forts gradients et sont sujets au phénomène de Gibbs (oscillations numériques ou *wiggles* au niveau des discontinuités). Malheureusement, l'opérateur de diffusion n'est généralement pas suffisant pour les dissiper, dès que le nombre de Reynolds est élevé, ce qui est le cas en LES. Cette particularité peut s'avérer particulièrement gênante car susceptible d'entraîner la divergence du calcul lorsqu'elle concerne des grandeurs bornées, comme la pression. Pour pallier à ce problème, différentes solutions sont possibles et l'une d'elles, adoptée dans AVBP est l'emploi d'opérateurs de diffusion artificielle dont le but est de lisser les gradients et supprimer les *wiggles*.

L'emploi de viscosité artificielle remonte aux travaux de Von Neumann et Richtmeyer [256, 101] qui avaient introduit une pression additionnelle dans les équations d'Euler (quantité de mouvement et énergie) calculée à partir de la divergence de la vitesse pour pouvoir supporter les chocs forts. Baldwin et McCormack ont ensuite introduit des viscosités artificielles d'ordres plus élevés, afin qu'elles agissent encore plus fortement au niveau des chocs mais aussi qu'elles préservent la précision de la solution loin de ceux-ci. Jameson, Schmidt et Turkel [107] ont perfectionné l'utilisation de la viscosité artificielle, en utilisant la combinaison linéaire d'opérateurs de viscosité (ordre 2) et d'hyperviscosité (ordre 4) et obtenant, de ce fait, d'excellents résultats en aérodynamique stationnaire. Ces opérateurs ont été adaptés plus tard à l'approche *cell-vertex* [54, 234, 214, 44]. Ils sont ajoutés directement à l'équation nodale (4.12), soit¹⁹ :

$$\frac{d\mathbf{U}_j}{dt} = - \left(\mathbf{N}_j + \left(\mathbf{D}_j^{(2*)} + \mathbf{D}_j^{(4*)} \right) \right) \quad (4.113)$$

et les termes $\mathbf{D}_j^{(2*)}$ et $\mathbf{D}_j^{(4*)}$ représentent les viscosité d'ordre 2 et 4 respectivement, et sont fonctions des opérateurs $\mathbf{D}_j^{(2)}$ et $\mathbf{D}_j^{(4)}$ que l'on va décrire dans les paragraphes suivants.

4.11.1 Viscosité artificielle du second ordre

Pseudo-Laplacien

L'opérateur de viscosité artificielle d'ordre 2 repose sur l'utilisation d'un *pseudo-Laplacien*, comme l'a décrit Crumpton [54], afin d'ajouter une dissipation supplémentaire dans l'équation aux différences

¹⁹Dans le cas des éléments finis, l'expression de l'équation nodale est légèrement différente : tous les termes de droite sont multipliés par le volume au noeud et il faut considérer la matrice de masse ! Dans tous les développements et analyses qui suivront, on ne considère pas ce détail pour la viscosité artificielle et on fera l'hypothèse de condensation de la matrice de masse.

au noeud j . Son expression est la suivante :

$$\mathbf{D}_j^{(2)} = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} -\frac{\epsilon^{(2)} \zeta_e V_e}{n_v^e \Delta t} (\bar{\mathbf{U}}_e - \mathbf{U}_j) \quad (4.114)$$

Le facteur V_e/n_v^e permet, à cet opérateur, de préserver la linéarité d'une solution (ordre 2 en stationnaire). $\epsilon^{(2)}$ est un paramètre utilisateur et ζ_e est un senseur permettant de détecter les forts gradients et évitant, ainsi, d'activer l'opérateur $\mathbf{D}_j^{(2)}$ dans tout le domaine de calcul.

Senseurs ζ_e

Le senseur ζ_e a été introduit par Jameson et al. [107]. Il est calculé à chaque cellule et sa valeur est comprise entre 0 et 1, cette valeur indiquant les zones où un maximum de viscosité artificielle doit être appliqué. Le senseur est construit en comparant deux évaluations de la variation d'un scalaire de référence (pression, énergie totale, fraction massique, nombre de gouttes...), réalisées sur deux stencils différents. Si les évaluations sont identiques, la solution est linéaire et $\zeta_e = 0$. Sinon le senseur se déclenche. L'important ici est que le senseur soit non nul, là où cela est utile. On va présenter ici les différents senseurs utilisés dans AVBP, pour contrôler la viscosité d'ordre 2.

Senseur de Jameson On le note ζ_e^J . Pour tout élément K_e , il correspond au maximum, sur l'ensemble des sommets, de l'évaluation ζ_k^J :

$$\zeta_e^J = \max_{k \in K_e} \zeta_k^J \quad (4.115)$$

ζ_k^J est définie pour un scalaire S donné :

$$\zeta_k^J = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |S_k|} \quad (4.116)$$

où Δ_1^k et Δ_2^k sont des mesures de variation de S dans la cellule qu'on explicite par :

$$\Delta_1^k = \bar{S}_e - S_k \quad (4.117)$$

$$\Delta_2^k = (\vec{\nabla} S)_k \cdot (\vec{x}_e - \vec{x}_k) \quad (4.118)$$

où $\bar{S}_e$ est la valeur moyenne du scalaire S dans la cellule. On précisera ensuite quelle variable est utilisée, en lieu et place du scalaire S . Il convient ici de préciser que l'évolution du senseur de Jameson est régulière et douce, dès que la solution n'est plus linéaire.

Senseur de Colin Comme le souligne Colin [44], le senseur de Jameson n'est pas conçu pour des écoulements turbulents instationnaires (il a été introduit dans le cadre de la résolution d'écoulements

aérodynamiques stationnaires), car il n'est nul que pour des gradients de pression constants au sein des cellules (solution linéaire). Or, dans une LES, il existe de nombreuses petites structures, assez peu résolues (sur peu de points), qui ont pour effet de déclencher le senseur et donc provoquer une application injustifiée de viscosité artificielle. L'effet obtenu est, évidemment, la dissipation des petites échelles résolues de la turbulence, ce qui rend le senseur de Jameson inutilisable pour une LES.

Colin [44] a donc défini un nouveau senseur ζ_e^C , plus approprié aux écoulements turbulents fortement instationnaires. Celui-ci devant être, à la fois, nul lorsque l'écoulement est suffisamment bien résolu et agir de façon sensible dans les zones de fortes non-linéarités. Les caractéristiques de ce senseur sont les suivantes :

- ζ_e^C est très petit lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont petites comparées à S_e . Ceci correspond à des erreurs numériques de faible amplitude (si Δ_1^k et Δ_2^k sont de signes opposés) ou à des faibles gradients bien résolus par le schéma (si Δ_1^k et Δ_2^k sont de même signe).
- ζ_e^C est petit lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont du même signe et du même ordre de grandeur (même s'il est grand). Ceci correspond aux gradients raides mais bien résolus par le schéma numérique.
- ζ_e^C est grand lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont de signes opposés et qu'un des deux est beaucoup plus grand que l'autre. Ceci correspond à une oscillation numérique de grande amplitude.
- ζ_e^C est grand si Δ_1^k et Δ_2^k est du même ordre de grandeur que S_e . Ceci correspond à une situation non physique résultant d'un problème numérique.

Il faut noter ici que ce senseur peut être utilisé pour l'équation de conservation des fractions massiques : la valeur de référence pour S_k est alors remplacée par 1, qui correspond au maximum d'une fraction massique.

La définition du senseur est la suivante :

$$\zeta_e^C = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{\Psi - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (4.119)$$

$$\text{avec : } \Psi = \max_{k|k \in K_e} \left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + \epsilon_1 S_k} \zeta_k^J \right) \quad (4.120)$$

$$\Delta^k = |\Delta_1^k - \Delta_2^k| - \epsilon^k \max(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k|) \quad (4.121)$$

$$\epsilon^k = \epsilon_2 \left(1 - \epsilon_3 \frac{\max(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k|)}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |S_k|} \right) \quad (4.122)$$

et les constantes du modèle ont pour valeur :

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \quad \delta = 1.10^{-2} \quad \epsilon_1 = 1.10^{-2} \quad \epsilon_2 = 0.95 \quad \epsilon_3 = 0.5$$

4.11.2 Viscosité artificielle du quatrième ordre

On s'intéresse ici au terme discret $\mathbf{D}_j^{(4)}$. Il s'agit d'un opérateur d'hyperdiffusion artificielle. Son rôle est de supprimer les oscillations noeud à noeud (à l'origine, il permettait, dans les cas stationnaires, d'équilibrer le nombre d'équations avec le nombre d'inconnues, en particulier lors de la présence de lignes soniques [234]) qui ne sont pas amorties par les méthodes *cell-vertex*. Contrairement à la diffusion artificielle d'ordre 2, qui est déclenchée en cas de besoin par les senseurs décrits précédemment, l'hyperdiffusion est activée dans l'ensemble du domaine (sauf là où la diffusion d'ordre 2 agit, voir plus

loin). Il s'agit donc d'un traitement de fond et s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbf{D}_j^{(4)} = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{\epsilon_e^{(4*)} V_e}{n_v^e \Delta t} \left[\left(\frac{1}{n_v^e} \sum_{k \in K_e} \vec{\nabla} \mathbf{U}_k \right) \cdot (\vec{x}_e - \vec{x}_j) - (\mathbf{U}_e - \mathbf{U}_j) \right] \quad (4.123)$$

A l'instar du pseudo-laplacien, le terme V_e/n_v^e permet d'assurer, à cet opérateur, la conservation de la linéarité de la solution, condition *sine qua non* pour ne pas dégrader la précision du schéma numérique de base. Le paramètre $\epsilon^{(4*)}$ s'écrit plus précisément :

$$\epsilon_e^{(4*)} = \max(0, \epsilon^{(4)} - \zeta_e \epsilon^{(2)}), \quad (4.124)$$

et $\epsilon^{(4)}$ est un paramètre fixé par l'utilisateur. La formulation (4.124) provient de [107]. Ce choix a été fait, afin d'éviter la réapparition d'oscillations non physiques, là où une grande quantité de viscosité artificielle d'ordre 2 est ajoutée (discontinuités ou chocs).

4.11.3 Application des opérateurs de viscosité artificielle

On va ici expliciter les opérateurs $\mathbf{D}_j^{(2*)}$ et $\mathbf{D}_j^{(4*)}$. Il existe plusieurs stratégies d'application de viscosité artificielle. On se place dans un cas 2D, la généralisation à la troisième dimension étant triviale. Ici on pose $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho_k)^T$ pour les deux premiers modèles présentés.

Modèle de Jameson (gaz)

Le premier modèle disponible est celui de Jameson et consiste à appliquer les opérateurs décrits précédemment à toutes les variables. Les scalaires de référence utilisés sont la pression et les fractions massiques.

$$\zeta_e = \max(\zeta_e^J(P), \zeta_e^Y) \quad \text{avec :} \quad \zeta_e^Y = \max_{k=1, neqs} (\zeta_e^C(\rho_k))$$

Et on a :

$$\mathbf{D}_j^{(2*)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{D}_j^{(2)} \quad (4.125)$$

ainsi que :

$$\mathbf{D}_j^{(4*)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{D}_j^{(4)} \quad (4.126)$$

Pour simuler des phénomènes transitoires dont l'intérêt est faible mais qui demeurent extrêmement difficiles à stabiliser, il arrive que la valeur de ζ_e soit automatiquement fixée à 1. Evidemment, cette option n'est utilisée qu'en cas de force majeure (option *iavisc* = -1 dans AVBP).

Modèle de Colin (gaz)

Le second modèle va de pair avec l'introduction du senseur de Colin. Le principe est assez similaire, mais toujours dans l'idée de l'utiliser pour des LES. Le choix de Colin est de ne pas interférer avec le schéma numérique pour la résolution de l'équation de quantité de mouvement. Aucune dissipation de fond n'est donc introduite dans cette équation. Le calcul senseur ζ_e , logiquement, n'utilise que la définition de Colin. Les scalaires de référence sont l'énergie totale et les fractions massiques :

$$\zeta_e = \max(\zeta_e^C(\rho E), \zeta_e^Y) \quad \text{avec :} \quad \zeta_e^Y = \max_{k=1, neqs} (\zeta_e^C(\rho_k))$$

Et on a :

$$\mathbf{D}_j^{(2*)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{D}_j^{(2)} \quad (4.127)$$

ainsi que :

$$\mathbf{D}_j^{(4*)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{D}_j^{(4)} \quad (4.128)$$

Modèle de Riber (phase dispersée)

Ce modèle est uniquement relatif à la résolution des équations de la phase dispersée et a été développé par Riber [192] et ne dépend pas du modèle choisi pour le gaz. Ici on pose $\mathbf{U} = (\rho_l \alpha_l, \rho_l \alpha_l u_l, \rho_l \alpha_l v_l, \rho_l \alpha_l h_l, n_l)^T$. Celui-ci est basé sur le modèle de Jameson avec quelques modifications des senseurs (pour éviter en particulier que le senseur s'active trop souvent). En effet, dans ce cas, les senseurs au sommet s'écrivent pour ces variables :

$$\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l) = \left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + (\rho_l \alpha_l)_k} \right)^2 \quad (4.129)$$

$$\zeta_k^R(n_l) = \left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + (n_l)_k} \right)^2 \quad (4.130)$$

$$\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l u_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + (V_e^e)^{1/3}} \quad (4.131)$$

$$\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l h_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |(\rho_l \alpha_l h_l)_k|} \quad (4.132)$$

et $\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l v_l)$ est calculé comme $\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l u_l)$. De là sont calculés les senseurs aux cellules de la même manière que pour les senseurs de Jameson et Colin. Enfin le senseur ζ_e s'écrit :

$$\zeta_e = \max(\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l), \zeta_k^R(n_l), \zeta_k^R(\rho_l \alpha_l u_l), \zeta_k^R(\rho_l \alpha_l v_l), \zeta_k^R(\rho_l \alpha_l h_l))$$

Le reste de la procédure est identique au modèle de Jameson.

Remarques

Les modèles présentés ci-dessus sont des modèles de dissipation scalaire, ce qui signifie que pour une variable donnée, les opérateurs de viscosité artificielle n'utilisent que cette variable dans leur construction, ce qui peut provoquer des comportements parfois assez éloignés de la physique. Un des défauts de ces opérateurs vient de l'excès de diffusion croisée (*cross-diffusion*) qu'ils peuvent appliquer. Certains travaux [234] ont été menés, afin d'introduire plus de physique dans le comportement de ces opérateurs en les construisant d'une manière assez similaire aux schémas upwind. Les opérateurs obtenus ne sont alors plus scalaires mais tensoriels. Toutefois, ceux-ci restent très lourds à mettre en oeuvre, en particulier, dès lors que le code de calcul est écrit pour des maillages non-structurés.

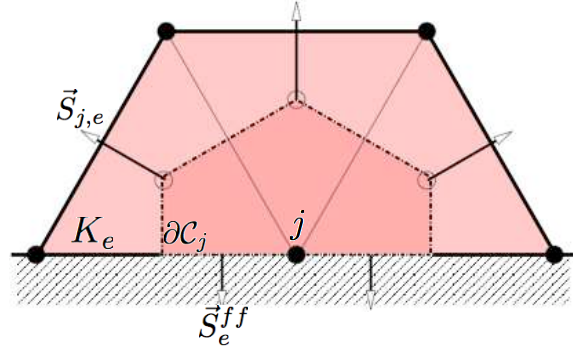
4.11.4 Viscosités de compression

Viscosité Von Neumann - Richtmeyer

Comme on l'a dit précédemment, la première viscosité artificielle introduite dans un calcul est due à Von Neumann et Richtmeyer [256, 101]. Qu'il s'agisse d'un calcul monophasique ou diphasique, le but est ici d'introduire un terme de pression supplémentaire (ajoutée aux équations de quantité de mouvement et d'énergie totale pour la phase continue et sur la vitesse pour la phase dispersée). Sa construction est basée sur la divergence de la vitesse (du gaz ou du liquide). On notera qu'il existe, en outre, des modèles de viscosité similaires, d'ordre plus élevé introduits par Cook et Cabot [51].

4.12 Schémas de bords et conditions aux limites

Jusqu'alors, on n'a pas considéré les limites du domaine de calcul Ω . Or, la façon dont elles sont traitées s'avère cruciale, comme on le verra par la suite. Deux points sont à considérer et seront décrits :

FIG. 4.16 - Volume de contrôle et normales pour un noeud j situé sur $\partial\Omega$.

- *Les schémas numériques au bord ou schémas de bord.* Il s'agit de la manière dont sont discrétisées les équations aux bords. La discrétisation spatiale est en effet modifiée car le *stencil* au bord ne correspond pas du tout à celui qu'on a au centre du domaine (au moins dans la direction normale à $\partial\Omega$). Les schémas de bord sont souvent négligés, en particulier dès qu'on sort des méthodes des différences finies et des maillages structurés, car il devient alors difficile de compenser la réduction du stencil. Pourtant, l'ordre de précision du schéma peut avoir une très forte influence sur la qualité de la solution.
- *Les conditions limites.* Elles peuvent être de différentes natures, en fonction du phénomène physique qu'elles permettent de décrire. Dans un code permettant de résoudre l'écoulement d'un fluide compressible, la gestion des différentes ondes, en particulier de nature acoustique, est primordiale afin d'éviter des réflexions non physiques.

4.12.1 Schémas de bords

Ordre de convergence

Compte tenu de la construction du résidu aux noeuds avec l'équation (4.12), il apparaît clairement, comme l'illustre la figure (4.16), que le noeud $j \in \partial\Omega$ ne reçoit des contributions que d'un côté. En 1D, sur un maillage régulier, l'opérateur de convection au milieu du domaine de calcul est égal à :

$$c \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_j = c \frac{U_{j+1} - U_{j-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2),$$

alors qu'au bord la même méthode donne :

$$c \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_N = c \frac{U_N - U_{N-1}}{h} + \mathcal{O}(h).$$

Ainsi, on voit que l'ordre de convergence se dégrade au bord, ce qui va diminuer la précision globale de la solution. Pour qu'un schéma maintienne globalement son ordre s de convergence, les opérateurs calculés aux bords ne doivent pas être d'un ordre inférieur strictement à $s - 1$ [30]. On comprend, dès lors, qu'il peut y avoir un problème potentiel avec les schémas de Taylor-Galerkin.

Termes de bord pour les dérivées secondes

Les dérivées secondes calculées avec l'opérateur de diffusion 2Δ , obtenu à partir de la méthode de Galerkin, sont utilisées pour déterminer les termes de diffusion numérique des méthodes Lax-Wendroff et Taylor-Galerkin, ainsi que les termes visqueux. L'opérateur présente deux parties, comme on l'a vu pour les équations (4.75) et (4.87), issues d'une intégration par parties. Le terme impliquant le bord du domaine Ω est nul partout, sauf aux frontières $\partial\Omega$. Jusqu'alors, on l'a ignoré et considéré nul. Ici, on va expliciter son calcul. Pour un noeud j situé au bord, l'équation (4.100) devient :

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V|_j &\approx \frac{1}{V_j} \int_{\partial\Omega} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{n} \phi_j dS - \frac{1}{V_j} \int_{\Omega} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{\nabla} \phi_j dV \\ &= \underbrace{\frac{1}{V_j} \int_{\partial\mathcal{C}_j \cap \partial\Omega} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{n} \phi_j dS}_{\text{terme de bord}} + \frac{1}{V_j} \int_{\partial\mathcal{C}_j} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{n} dS\end{aligned}\quad (4.133)$$

Le terme de bord de l'équation (4.133) est une manière naturelle d'introduire les conditions limites pour l'opérateur de diffusion "physique". En effet, si la valeur de la variable calculée est connue (condition de Dirichlet), alors le terme de bord est nul, sinon il s'agit d'une condition de type flux (Neumann) et $\vec{\mathcal{F}}_h^V$ est remplacé par la condition limite du problème, dans le calcul de l'intégrale.

Les problèmes apparaissent avec les schémas LW, ETG et TTG. Leur développement analytique fait aussi apparaître les termes de bord (voir équation (4.87)). Il s'agit de schémas numériques pour la convection, dans lesquels on a introduit des termes de diffusion (à partir des dérivées temporelles d'ordre supérieur ou égal à deux - voir par exemple l'équation (4.19)). Or, ceci change la nature de l'équation à résoudre : on passe alors d'un problème hyperbolique à un problème parabolique nécessitant donc plus de conditions limites. Cela peut se traduire par un paradoxe parfois difficile à gérer dans le cas des équations d'Euler : l'équation aux différences demande alors **plus de conditions limites** que le problème mathématique originel ! On étudiera l'influence du terme de bord dans le chapitre 6. Pour ce faire, on introduit ici de nouvelles notations et dénominations pour les termes de bord :

Si on reprend l'équation (4.87), on peut écrire :

$$\begin{aligned}\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) &= \oint_{\partial\Omega} \phi_j \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h \right)^n \cdot \vec{n} dS - \int_{\Omega} \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h \right)^n \cdot \vec{\nabla} \phi_j dV \\ &= \mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n) + \mathbf{LL}_j^0(\mathbf{U}_h^n)\end{aligned}\quad (4.134)$$

En développant le premier terme de (4.134), on obtient :

$$\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n) \approx \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h \right)_{\partial K_e}^n \cdot \int_{\partial\Omega \cap \partial K_e} \phi_j \vec{n} dS \quad (4.135)$$

$$= \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{1}{n_{v,ff}^e} \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h \right)_{\partial K_e}^n \cdot \vec{S}_e^{ff} \quad (4.136)$$

où l'exposant ff indique la face de la cellule K_e située sur la frontière $\partial\Omega$. Pour simplifier le calcul de $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n)$, on a considéré $\left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h \right)_{\partial K_e}^n$ constant sur ∂K_e .

Comme ce terme est issu de la méthode numérique, il n'y a pas de condition limite physique qui permette de fixer une valeur à $\left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h\right)_{\partial K_e}^n$ qui est un terme provenant d'une dérivée du second ordre. Les équations d'Euler n'ont pas besoin de conditions limites de ce type. Pourtant, il faut bien fixer une valeur à ce terme. Afin de la choisir et de voir si ce terme a une réelle influence, deux formulations ont été testées et étudiées pendant cette thèse :

- Formulation USOT (pour *Un-cancelled second order term*) : elle consiste à considérer que $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n) = 0$ et donc à ne calculer que $\mathbf{LL}_j^0(\mathbf{U}_h^n)$ pour le noeud j du bord.
- Formulation CSOT (pour *Cancelled second order term*) : le terme de bord $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n)$ est calculé de manière à annuler toute la contribution $\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n)$ au noeud de bord j . Cela revient à écrire : $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n) = -\mathbf{LL}_j^0(\mathbf{U}_h^n)$. La conséquence, pour le noeud j , est de supprimer toute la contribution $\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n)$. Il ne reste plus au bord que $\mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n)$.

4.12.2 Conditions limites

Introduction

Les conditions limites permettent de fermer un problème mathématique en spécifiant les valeurs que doivent prendre la solution et/ou ses dérivées aux frontières du domaine de calcul [8]. La qualité de la solution dépend donc directement du choix de celles-ci, quel que soit le phénomène étudié. Dans un code résolvant les équations de Navier-Stokes pour des fluides compressibles, ce point est d'autant plus crucial, du fait de l'acoustique. Les conditions doivent alors respecter un cahier des charges particulièrement vaste [180] :

- Imposer les valeurs cibles du problème pour toutes les grandeurs (vitesses, pression, température ou flux d'espèce, de chaleur) aux entrées-sorties du domaine.
- reproduire correctement l'acoustique : impédances nulles aux murs, réflexions totales ou partielles aux entrées ou aux sorties.
- modéliser la présence d'une couche limite, là où la résolution ne permet pas de simuler les détails de l'écoulement.

Pour ce faire, il existe différents types de conditions limites dans AVBP qu'on présente dans ce qui suit. On rappelle (pour un schéma numérique à 1 étape temporelle, par simplicité²⁰) qu'on peut écrire la mise à jour temporelle, en tout point, de la manière suivante dans AVBP :

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \mathbf{N}_j \Delta t \quad (4.137)$$

Aux noeuds du bord, les valeurs prédites par le schéma numérique doivent être corrigées pour tenir compte des conditions limites. La procédure est la suivante :

- Les mises à jour temporelles (ou résidus au noeud) sont calculées pour **tous** les noeuds du maillage, y compris ceux du bords. On obtient alors le résidu au noeud suivant : $\mathbf{N}_j^{(p)}$ avec (p) pour "prédit" (par le schéma).
- Pour les noeuds du bord, les mises à jour sont ensuite corrigées, de manière à imposer les conditions limites de la façon désirée. On a alors : $\mathbf{N}_j^{(c)}$ avec (c) pour "corrigé" (par les conditions limites).

²⁰La procédure est exactement la même en multi-étapes car on impose les conditions limites à chaque sous-étape [111, 120]

- On utilise enfin l'équation (4.137) avec $\mathbf{N}_j^{(c)}$ pour les noeuds du bord, afin de calculer les variables au temps $n + 1$

Il reste à déterminer la manière dont la correction de la mise à jour nodale est réalisée. Il existe plusieurs façons différentes de procéder à son calcul :

- **Conditions limites "classiques"**
- **Conditions limites caractéristiques**
- **Lois de paroi**

Conditions de type Dirichlet et Neumann

Etant donné qu'AVBP résout les équations des écoulements compressibles et l'importance de l'acoustique (et donc des réflexions aux entrées/sortie du domaine), la seule condition limite de ce type utilisée dans les calculs de cette thèse, modélise "les murs adiabatiques glissants" et impose :

- *Flux de chaleur et d'espèces nuls (condition de Neumann)* : compte tenu de la construction des schémas numériques utilisés dans AVBP, ces conditions sont naturellement imposées pendant le calcul de prédiction de $\mathbf{N}_j^{(p)}$ en remplaçant la partie normale des flux $\vec{\mathcal{F}}_j^n \cdot \vec{n}_j$ par les flux imposés par la condition limite, c'est-à-dire zéro ici. Ces flux corrigés sont ensuite utilisés dans le calcul des divergences.
- *Vitesse normale nulle* :

$$(\vec{u} \cdot \vec{n})^{(c)} = 0$$

- Pour le reste des grandeurs, on garde les valeurs prédites par le schéma (en tenant compte du fait que la vitesse normale est nulle), soit :

$$(\rho Y_k)^{(c)} = (\rho Y_k)^{(p)} \quad (\rho Y_k)^{(c)} = (\rho Y_k)^{(p)} \quad (\rho E)^{(c)} = (\rho E)^{(p)} - (\rho e_{c,\vec{n}})^{(p)}$$

Les mises à jour au bord sont donc corrigées de façon à prendre en compte les modifications imposées par la condition limite. Comme on le verra par la suite, cette condition limite, pourtant utilisée dans la vaste majorité des codes de calcul industriels ou de recherche, peut rendre instable un calcul.

Il convient ici de préciser que les conditions limites pour la phase dispersée sont imposées de la même manière. Lorsqu'il s'agit d'une entrée, toutes les grandeurs sont imposées (et donc les valeurs prédites sont écrasées). Pour une sortie, on garde les valeurs prédites par les schémas.

Conditions limites par décomposition en ondes caractéristiques

Les conditions limites caractéristiques (notées *ECBC*) ont été tout d'abord décrites par Thompson, [244, 243] puis généralisées aux équations de Navier-Stokes par Poinot et Lele [175] (*NSCBC*). Ces développements ont ensuite été étendus par Baum et al. [18] aux écoulements multi-espèces, pour permettre l'étude des écoulements réactifs, puis adaptés par Moureau et al. dans AVBP [156]. Un des domaines principaux d'application des conditions caractéristiques est l'aéro-acoustique [49, 48, 50]. On notera qu'il existe, en outre, des adaptations pour une intégration temporelle implicite [182] et que des améliorations ont été proposées, pour tenir compte des effets tangentiels, visqueux ou dus aux termes sources [238]. Enfin, Nicoud [159] fait une comparaison entre différentes formulations des conditions caractéristiques, dont on parlera par la suite.

Principe Le principe des conditions limites caractéristiques est le suivant : les ondes sortant du domaine sont calculées correctement (elles contiennent l'information provenant de l'amont, dans le domaine de calcul) et ne doivent pas être modifiées. En revanche, les ondes arrivant de l'extérieur du domaine (et contenant une information venant de l'aval) ne sont pas calculées par le schéma numérique et doivent être fournies par l'utilisateur. Les valeurs fournies par celui-ci sont les conditions limites, dites *physiques*.

La description des conditions limites qui suit s'inspire du manuel d'AVBP et de [159].

Construction de la condition limite La mise à jour temporelle explicite du schéma numérique s'écrit²¹ :

$$\partial \mathbf{U} = \mathbf{U}^{(p)} - \mathbf{U}^n = -\mathbf{N}^{(p)} \Delta t \quad (4.138)$$

Le résidu au noeud $\mathbf{N}_j^{(p)}$ peut être décomposé en deux parties :

$$\partial \mathbf{U} = -\Delta t \left(\mathbf{N}^{(p,CL)} + \mathbf{N}^{(p,u)} \right) \quad (4.139)$$

$\mathbf{N}_j^{(p,CL)}$ est la partie corrigée par le traitement de la condition limite et $\mathbf{N}_j^{(p,u)}$ n'est pas modifiée. Le but du traitement de la condition limite est de construire la valeur de la solution $\mathbf{U}$ au temps $n + 1$.

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n - \Delta t (\mathbf{N}^{(c,CL)} + \mathbf{N}^{(p,u)}) \quad (4.140)$$

où $\mathbf{N}^{(c,CL)}$ est la partie du résidu qui a été corrigée et qui dépend de $\mathbf{N}^{(p,u)}$, de $\mathbf{U}^n$, du type de condition limite choisie, ainsi que des valeurs cibles fournies par l'utilisateur. La correction est calculée de la manière suivante :

$$\mathbf{N}^{(c,CL)} = \mathbf{N}^{(p,CL)} - \mathbf{N}^{(p,in)} + \mathbf{N}^{(c,in)} \quad (4.141)$$

ce qui signifie qu'on enlève la partie "fausse" du résidu notée $\mathbf{N}^{(p,in)}$ (ondes entrantes) et qu'on la remplace par une contribution calculée par les conditions limites $\mathbf{N}^{(c,in)}$. Il reste à faire le choix de la partie du résidu à modifier $\mathbf{N}^{(p,CL)}$.

Dans AVBP, il existe deux méthodes pour modifier $\mathbf{N}^{(p,CL)}$ et obtenir $\mathbf{N}^{(c,CL)}$: la première est basée sur une formulation spatiale et la seconde réside sur une interprétation temporelle. Il existe toutefois d'autres stratégies comme :

- Modification des termes d'advection dans les équations bicaractéristiques [101]
- Décomposition de Fourier des équations d'Euler linéarisées aux bords [88]
- Prise en compte des termes visqueux et des termes sources [238]
- Décomposition entre une partie convective et une partie acoustique pour construire les ondes [182]

On ne les présentera pas ici puisqu'elles ne sont pas utilisées à l'heure actuelle dans le code. Des détails et comparaisons de ces méthodes peuvent être trouvés dans [159, 163]

Formulation spatiale Il s'agit de la forme initiale de la méthode NSCBC de Poinso et Lele [175], la variation des grandeurs caractéristiques $\mathbf{W}$ ²² est exprimée grâce aux gradients de celles-ci :

$$\partial \mathbf{W} = -\underline{\mathbf{A}} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial n} \Delta t \quad (4.142)$$

²¹On s'affranchira de l'indice spatial j dans cette partie pour alléger les notations.

²²La grandeur $\partial \mathbf{W}$ est souvent nommée *strength*.

où $\mathbf{\Lambda}$ est la matrice diagonale $m \times m$ contenant les valeurs propres (donc les vitesses de propagation des ondes) de la matrice $\vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{n}$, où $\vec{n}$ est choisi orthogonal aux frontières du domaine Ω . L'équation (4.142) signifie que la variation des grandeurs caractéristiques est proportionnelle aux gradients normaux de ces variables. On introduit, à la manière de Poinot et Lele [175], la notation $\mathcal{L}$ telle que :

$$\mathcal{L} = \underline{\mathbf{\Lambda}} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial n} \quad (4.143)$$

Le lecteur peut se référer à [235, 101, 180] pour plus de détails concernant la méthode NSCBC et les relations entre les différentes variations $\partial \mathbf{U}$, $\partial \mathbf{W}$, figurent dans ces manuscrits les tenseurs Jacobiens des flux.

Pour construire la condition limite, comme on l'a décrite précédemment, il faut obtenir les variations $\partial \mathbf{W}$ à partir du résidu prédit $\mathbf{N}^{(p)}$. Ce calcul est réalisé en utilisant l'approche du *résidu normal* (*normal residual approach*). Ceci correspond à la méthode NSCBC [175] dans laquelle les dérivées spatiales normales à la frontière sont utilisées pour corriger le résidu $\mathbf{N}^{(p,CL)}$. Pour ce faire, le résidu prédit $\mathbf{N}^{(p)}$ est décomposé en deux parties :

$$\mathbf{N}^{(p)} = \overbrace{\mathbf{N}_n^{(p)}}^{\text{partie normale}} + \overbrace{\mathbf{N}_t^{(p)} + \mathbf{N}_{Diffusion}^{(p)} + \mathbf{N}_{Sources}^{(p)}}^{\text{partie non-normale}} \quad (4.144)$$

La formulation NSCBC stipule que seule la partie normale doit être modifiée, ce qui s'écrit :

$$\mathbf{N}^{(p,CL)} = \mathbf{N}_n^{(p)}, \quad (4.145)$$

ce qui implique que :

$$\mathbf{N}^{(p,u)} = \mathbf{N}_t^{(p)} + \mathbf{N}_{Diffusion}^{(p)} + \mathbf{N}_{Sources}^{(p)} \quad (4.146)$$

La partie normale du résidu peut être définie de la manière suivante :

$$\mathbf{N}_n^{(p)} = \underline{\mathbf{E}}_{\mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial n} \quad (4.147)$$

où $\underline{\mathbf{E}}_{\mathbf{U}} = \underline{\mathbf{A}}_{\mathbf{U}} n_x + \underline{\mathbf{B}}_{\mathbf{U}} n_y + \underline{\mathbf{C}}_{\mathbf{U}} n_z = \vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{n}$ est la matrice Jacobienne (des variables conservatives) normale. En réalisant une décomposition classique en ondes ([235, 180]), on a :

$$\underline{\mathbf{E}}_{\mathbf{U}} = \underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} \underline{\mathbf{\Lambda}} \underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \quad (4.148)$$

$\underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}}$ est la matrice contenant les vecteurs propres à droite (vecteurs-colonnes) et $\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}}$ les vecteurs propres à gauche (vecteurs-lignes) de $\underline{\mathbf{E}}_{\mathbf{U}}$. Les valeurs prédites pour la variation des grandeurs caractéristiques s'écrivent :

$$\partial \mathbf{W}^{(p)} = +\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \partial \mathbf{U}^{(p)} = -\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} \underline{\mathbf{\Lambda}} \underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}^{(p)}}{\partial n} \Delta t = -\underline{\mathbf{\Lambda}} \underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}^{(p)}}{\partial n} \Delta t \quad (4.149)$$

La variation des variables caractéristiques est, de ce fait, calculée en utilisant les dérivées normales des variables conservatives. Les conditions limites permettent d'exprimer les ondes entrantes $\mathbf{W}^{(in)}$ et la solution est ensuite, de nouveau, réécrite en fonction des grandeurs conservatives et incluse au résidu (Eq.(4.141)).

$$\mathbf{N}^{(c,CL)} \Delta t = (\mathbf{N}^{(p,CL)} - \mathbf{N}^{(p,in)} + \mathbf{N}^{(c,in)}) \Delta t \quad (4.150)$$

$$= (\underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} \partial \mathbf{W}^{(p)} - \underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} \partial \mathbf{W}^{(p,in)} + \underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} \partial \mathbf{W}^{(c,in)}) \Delta t \quad (4.151)$$

La mise à jour s'écrit finalement :

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n - \mathbf{N}^{(c,CL)} \Delta t - \left[\mathbf{N}_t^{(p)} + \mathbf{N}_{Diffusion}^{(p)} + \mathbf{N}_{Sources}^{(p)} \right] \Delta t$$

On notera, tout de même, que le calcul des ondes entrantes ne tient pas compte des termes tangentiels, visqueux et chimiques. Certaines méthodes récentes [238, 261] incluent ces termes dans le calcul des ondes, ce qui permet dans certains cas des améliorations significatives.

O. Colin a développé, dans sa thèse [44], une alternative pour calculer la partie normale du résidu . L'idée est d'écrire le résidu normal en soustrayant la partie tangentielle au résidu prédit total :

$$\mathbf{N}^{(p,CL)} = \mathbf{N}_n^{(p)} = \mathbf{N}^{(p)} - \mathbf{N}_t^{(p)} \quad (4.152)$$

La partie tangentielle est, en effet, *a priori* mieux calculée car utilisant plus de noeuds (schéma centré) que la partie normale (schéma décentré).

Formulation temporelle La formulation originelle introduite par Thompson [244] est basée sur des variations temporelles et non spatiales comme précédemment.

$$\partial \mathbf{W} = \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} \Delta t \quad (4.153)$$

Les variations des variables caractéristiques sont donc déterminées à partir d'une variation temporelle des variables primitives (ou conservatives). Leur calcul est réalisé selon l'approche du résidu total (*full residual*). Cela signifie que les modifications dues aux conditions limites se font sur $\mathbf{N}^{(p)}$ et non $\mathbf{N}_n^{(p)}$. Par conséquent, la partie non modifiée du résidu est nulle, ce qui donne : $\mathbf{N}^{(p,CL)} = \mathbf{N}^{(p)}$ et : $\mathbf{N}^{(p,u)} = \mathbf{0}$. Ici, seul le résidu $\mathbf{N}^{(p)}$ est utilisé. Les gradients normaux n'interviennent donc pas dans le calcul des ondes. On a donc :

$$\partial \mathbf{W}^{(p)} = \underline{\mathbf{L}}_U \partial \mathbf{U} = -\underline{\mathbf{L}}_U \mathbf{N}^{(p)} \Delta t \quad (4.154)$$

Comme dans le cas de la formulation spatiale, les ondes sortant du domaine ne sont pas modifiées, alors que les ondes entrantes sont corrigées. Une fois le résidu modifié, on obtient, comme pour la formulation spatiale, la relation suivante :

$$\mathbf{N}^{(c,CL)} \Delta t = (\mathbf{N}^{(p,CL)} - \mathbf{N}^{(p,in)} + \mathbf{N}^{(c,in)}) \Delta t \quad (4.155)$$

La mise à jour temporelle s'écrit alors :

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n - \mathbf{N}^{(c,CL)} \Delta t \quad (4.156)$$

Lois de parois

L'un des points faibles de la LES à l'heure actuelle concerne le traitement de l'écoulement proche parois [173, 211, 212]. En effet, la résolution nécessaire pour décrire les mécanismes se produisant dans la couche limite turbulente rendrait les calculs beaucoup trop coûteux. La solution adoptée et implantée dans AVBP est l'utilisation d'une loi de paroi logarithmique pour la vitesse, afin de prédire correctement le frottement. Ce choix a été fait pour sa relative simplicité et son faible coût de calcul en comparaison

avec d'autres modèles plus perfectionnés. On rappelle ici brièvement les principes de la loi de paroi pour des murs adiabatiques (seules conditions de ce type utilisée dans cette thèse). Pour plus de détails, le lecteur peut se référer à [211].

Il faut rappeler que la méthode numérique utilisée dans AVBP est une formulation *cell-vertex*. Par conséquent, toutes les données (donc la vitesse, la température...) sont disponibles à la paroi et peuvent être imposées, au même titre que le frottement. Toutefois, fixer la vitesse à zéro à la paroi (en plus d'imposer le gradient) serait beaucoup trop contraignant, dans le calcul et conduirait à des oscillations non physiques. Le choix est donc de laisser libre la vitesse, en considérant que le premier point de calcul se trouve déjà dans le fluide, à une distance δ_c suffisamment petite pour ne pas la considérer dans le calcul de y_w (qui correspond à la distance entre le deuxième point de calcul et la paroi).

Afin de pouvoir utiliser cette condition limite de loi de paroi, certains pré-requis doivent être respectés : la résolution doit être suffisamment lâche pour inclure les structures turbulentes qu'on rencontre près des murs et l'hypothèse doit être applicable (pas de décollement de la couche limite...). L'algorithme relatif à la condition limite est alors le suivant [211] :

Etape	Description
1	Calcul de u_τ grâce aux Eqs.(4.158) ou (4.159) et (4.157). Les valeurs d'entrée sont la vitesse au deuxième point de calcul u_2 , la viscosité à la paroi : $\nu = \nu(T_1)$ et la distance à la paroi : $y_w = \Delta y$.
2	Calcul du frottement pariétal τ_w , via l'équation (4.160) et $\rho = \rho_1$.
3	Application de τ_w et $q_w = 0$ et avancer en temps les équations.
4	Enlever la composante normale à la paroi de la vitesse $\vec{u}_1$ puis retour à l'étape 1.

TAB. 4.4 - Algorithme de calcul de la condition limite de loi de paroi pour un mur adiabatique

On rappelle les définitions classiques des grandeurs utilisées pour le fonctionnement de cette condition limite. Les deux grandeurs adimensionnées principales sont données par :

$$y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu} \quad (4.157)$$

$$u^+ = y^+ \quad \text{si } y^+ \leq 11,445 \quad (4.158)$$

$$u^+ = \kappa^{-1} \ln(E y^+) \quad \text{si } y^+ > 11,445 \quad (4.159)$$

avec $\kappa = 0.41$ la constante de Von Karman et $E = 9.2$, une constante d'intégration (toutes deux déterminées expérimentalement). La loi (4.158) correspond à la loi linéaire et la loi (4.159) est la loi logarithmique. Le frottement pariétal s'écrit :

$$\tau_w = \rho u_\tau^2 \quad (4.160)$$

Chapitre 5

Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - domaine périodique

Introduction

On va désormais caractériser les performances des différents schémas numériques de convection présentés dans le chapitre 4. Ici, l'étude des discrétisations est faite dans un domaine périodique car on s'intéresse d'abord au comportement du code "au milieu" du domaine de calcul. Le traitement des bords sera évoqué au chapitre 6.

Pour ce faire, on s'appuie principalement sur **l'équation de convection linéaire à coefficients constants**, qu'on rappelle :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} u = 0, \quad (5.1)$$

et qu'on étudie sur des domaines mono- et bidimensionnels. On choisit (5.1), car elle représente la description la plus simple du transport d'une grandeur et ses discrétisations sont assez simples à formuler. Comme le souligne Sengupta [221], l'étude de (5.1) est **nécessaire**, la plupart du temps, pour comprendre, quantifier et anticiper les erreurs introduites par les opérateurs discrets, connaître la précision du résultat obtenu et s'assurer de la stabilité de la méthode choisie. Hélas, si ces renseignements sont précieux, ils ne sont **pas** toujours **suffisants**. Vérifier qu'un schéma numérique permet de résoudre correctement cette équation d'onde est primordial, mais n'implique pas automatiquement qu'il se comportera de manière satisfaisante dans le cas des équations de Navier-Stokes.

Nous rappelons, dans un premier temps, quelques notations utiles (soit courantes dans la littérature, soit inspirées du travail de Vichnevetsky [254]), afin d'introduire les discrétisations présentées chapitre 4

dans les cas mono- et bidimensionnels sur des maillages réguliers. On utilise les méthodes de Von Neumann et de l'équation résolue appliquées à ces schémas numériques, afin de rappeler des résultats connus (différences centrées, Lax-Wendroff) et en présenter d'autres, mettant en avant la supériorité des schémas Taylor-Galerkin et justifiant le choix des méthodes adoptées dans AVBP pour la résolution des SGE. Des cas tests permettent, en outre, de confirmer les résultats analytiques.

5.1 Présentation du problème et notations

On étudie l'équation de convection linéaire et le système des équations d'Euler linéarisées pour un écoulement isentropique, qu'on explicitera plus tard. On se place dans un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ avec d , le nombre de dimensions spatiales. La définition de Ω est la suivante :

$$\begin{cases} d = 1 & : \quad \Omega = (0, 1) \\ d = 2 & : \quad \Omega = (0, 1) \times (0, 1) \end{cases}$$

Le domaine $\Omega \times \mathbb{R}^+$ est discrétisé de manière régulière dans chaque dimension en introduisant un pas d'espace $h = 1/N$ avec $N \in \mathbb{N}_*$ et un pas de temps Δt strictement positifs. Les noeuds du maillage (spatio-temporel) s'écrivent donc :

$$\begin{cases} d = 1 & : \quad (x_j, t^n) = (jh, n\Delta t) \\ d = 2 & : \quad (x_j, y_l, t^n) = (jh, lh, n\Delta t) \end{cases}$$

On présente les notations utilisées pour le cas $d = 1$. Les solutions au noeud (x_j, t^n) s'écrivent : $u(x_j, t^n) = u_j^n$, tandis que la solution numérique donnée par le système discrétisé est notée : U_j^n . Pour l'étude, on associera le vecteur solution $(U_j^n)_{0 \leq j \leq N}$ à une fonction constante par morceaux avec $U^n(x) = U_j^n \quad \forall x \in]x_j - \frac{h}{2}, x_j + \frac{h}{2}[$. On notera l'erreur au noeud (x_j, t^n) : $\epsilon_j^n = u_j^n - U_j^n$. On introduit de plus les opérateurs suivants :

- E : opérateur de décalage spatial, tel que $U_{j+1}^n = EU_j^n$.
- Z : opérateur de décalage temporel, tel que $U_j^{n+1} = ZU_j^n$.
- $\Delta_0 = \frac{1}{2}(E - E^{-1})$: opérateur de différences centrées permettant de discrétiser les dérivées spatiales d'ordre 1 et tel que : $\Delta_0 U_j = \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_j h + \mathcal{O}(h^3)$.
- $\delta^2 = (E - 2 + E^{-1})$: opérateur de différences centrées permettant de discrétiser les dérivées spatiales d'ordre 2 et tel que : $\delta^2 U_j = \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_j h^2 + \mathcal{O}(h^4)$.
- $M = \frac{1}{6}(E + 4 - E^{-1})$ l'opérateur "matrice de masse", pour les méthodes éléments finis.
- $\nu = \frac{c\Delta t}{h}$: nombre CFL, comme on l'a introduit dans le chapitre 4.

5.2 Analyse spectrale et équation résolue - étude monodimensionnelle

5.2.1 Quelques définitions

On va tout d'abord faire des rappels sur les outils d'analyse numérique [100, 254, 221, 8] permettant de décrire en détails les performances des schémas numériques utilisés dans cette thèse. En considérant les notations précédentes, on va écrire les discrétisations totales disponibles dans AVBP. La forme générale des schémas sera exprimée de la façon suivante :

$$U_j^{n+1} = H(\Delta t, A, Z) U_j^n \quad (5.2)$$

où H est la méthode d'avancement en temps et A est l'opérateur de semi-discrétisation spatiale de l'équation (5.1) tel que :

$$\frac{dU_j}{dt} = -AU_j, \quad (5.3)$$

ce qui donne sous forme matricielle (en reprenant les notations du chapitre 4 :

$$\frac{d\{U\}}{dt} = -[A]\{U\} \quad (5.4)$$

Si on se réfère au chapitre précédent, on a ici $N_j = AU_j$, ce qui correspond au résidu écrit au noeud j . On rappelle que la discrétisation temporelle est de type Euler ou Runge-Kutta. La formulation en trois étapes à faible stockage s'écrit :

$$H(\Delta t, A, Z) = \sum_{m=0}^3 \frac{(-\Delta t A)^m}{m!} \quad (5.5)$$

Erreur de troncature

Elle permet d'étudier la consistance d'un schéma numérique *au sens des différences finies*. La consistance permet de vérifier que le problème discrétisé tend vers le problème continu, lorsque h et Δt tendent vers zéro. L'erreur de troncature permet en outre, et c'est ce qui nous intéresse le plus ici, d'évaluer la précision du schéma [8]. Pour définir l'erreur de troncature, on utilise deux nouvelles notations :

$$\mathcal{L} := \frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.6)$$

est l'opérateur correspondant l'équation (5.1) et donc : $\mathcal{L}(u) = 0$. En utilisant (5.2), sa discrétisation s'écrit :

$$L_{h,\Delta t}(U_j^n) = U_j^{n+1} - H(\Delta t, A, Z)U_j^n = 0. \quad (5.7)$$

L'erreur de troncature s'écrit alors :

$$\mathcal{L}(u(x_j, t^n)) - L_{h,\Delta t}(u(x_j, t^n)) = ET_{h,\Delta t} \quad (5.8)$$

Concrètement, elle se calcule en injectant la solution exacte u dans l'opérateur aux différences approximant $\mathcal{L}$, puis en remplaçant les opérateurs discrets par des séries de Taylor, en espace et en temps, de la solution autour de (x_j, t^n) . Cela nécessite donc que **la solution soit suffisamment régulière** en (x_j, t^n) . On dira que le schéma numérique est précis à l'ordre p en espace et q en temps, si on a :

$$ET_{h,\Delta t} = \mathcal{O}(h^p) + \mathcal{O}(\Delta t^q)$$

Un calcul d'erreur "expérimental" (via une simulation numérique) devra donc se faire en s'assurant, au préalable, que la solution initiale est suffisamment régulière (d'où le choix classique d'une gaussienne). La condition de consistance, au sens des différences finies, est que $ET_{h,\Delta t}$ tende vers zéro quand h et Δt tendent vers zéro.

Stabilité

Une propriété importante pour un schéma est sa stabilité. Elle assure qu'on obtient la solution au problème discrétisé, qu'on cherche à résoudre. Un schéma instable provoque en général l'arrêt du calcul, à cause de la divergence des résultats obtenus. Au sens des différences finies, un schéma est stable s'il existe une constante strictement positive K , indépendante des pas d'espace et de temps h et Δt , telle que pour tout $n \geq 0$:

$$\|U^n\| \leq K \|U^0\|$$

où $\|\cdot\|$ est une norme qu'on peut définir de la manière suivante (pour $d = 1$) :

$$\|U^n\|_p = \left(\sum_{j=0}^N h |U_j^n|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad 1 \leq p \leq +\infty \quad (5.9)$$

et qu'on appelle norme L^p (voir discussion p.39 [8]). Pour $p = +\infty$, on a :

$$\|U^n\|_\infty = \max_{j=0,\dots,N} |U_j^n| \quad (5.10)$$

Notion de convergence La convergence de la méthode discrète signifie que la solution qu'on obtient en résolvant l'équation aux différences (5.7), tend vers la solution exacte de l'équation différentielle (5.1) quand h et Δt tendent vers zéro.

D'après le **théorème de Lax**, un schéma converge vers la solution de l'équation différentielle qu'il approxime si et seulement s'il est stable et consistant. On peut donc écrire :

$$\boxed{\text{CONSISTANCE}} + \boxed{\text{STABILITE}} = \boxed{\text{CONVERGENCE}}$$

Cette définition est valable, non seulement pour les différences finies, mais aussi pour les volumes et les éléments finis. Les définitions de consistance et de stabilité sont alors différentes (voir par exemple

l'équation (4.4)) [127, 185, 8]. Cependant, par la suite, nous serons principalement intéressés par la stabilité en norme L^2 , la dissipation, la diffusion et la précision des schémas. Pour notre cas d'étude dans ce chapitre (convection linéaire sur maillage régulier), on pourra traiter les schémas numériques avec les définitions présentées précédemment et traiter toutes les équations aux différences obtenues de la même manière (qu'elles soient issues des différences, volumes ou éléments finis) ¹

5.2.2 Analyse de Fourier et méthode de Von Neumann

On suppose désormais qu'on se situe sur un **domaine monodimensionnel périodique de longueur unité**². Dès lors on a :

$$u(x + 1, t) = u(x, t) \quad \forall t > 0$$

et donc :

$$U_0^n = U_N^n \quad \forall n > 0$$

Les fonctions u et U sont donc périodiques et peuvent donc s'écrire sous la forme de séries de Fourier [8], au temps $t = t^n$. On a par exemple (attention, ici la longueur du domaine est 1 donc elle n'apparaît pas !) :

$$U_j^n = \sum_{p \in \mathbb{Z}} \hat{U}^n(p) e^{2i\pi p x_j} \quad (5.11)$$

et $\hat{U}$ est le coefficient de Fourier en espace défini ici par :

$$\hat{U}^n(p) = \int_0^1 U(x, t^n) e^{-2i\pi p x} dx \quad (5.12)$$

On introduit le nombre d'onde : $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ et $\lambda = \frac{1}{p}$ la longueur d'onde. D'après le critère de Nyquist, on a : $\lambda \in [2h, Nh]$ (et il y a aussi l'harmonique $p = 0$ qui représente la solution constante).

Solution exacte

Avant d'utiliser l'analyse de Fourier, on rappelle que la solution de l'équation (5.1) est illustrée par la figure (5.1). La solution à un instant t est donnée par la translation de la solution initiale d'une distance $d = c t$ car on peut écrire : $u(x, t) = u(x - ct, 0) = u_0(x - ct)$.

Si on fait abstraction des sommes (ce qui revient à étudier la solution harmonique par harmonique³) et qu'on utilise $\hat{U}$ dans (5.1), on peut écrire que pour tout k :

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} + i k c \hat{u} = 0 \quad (5.13)$$

¹On a déjà démontré dans le chapitre précédent que les schémas d'AVBP sont construits pour être consistants aux sens des volumes finis et conservatifs, on ne reviendra pas sur ces notions ici.

²Comme le souligne certains auteurs [8], on peut très bien faire l'analyse qui suit dans $\mathbb{R}$ au lieu de $[0, 1]$, en remplaçant les séries de Fourier par des intégrales. Les conclusions obtenues sont les mêmes dans un cas comme l'autre.

³L'étude de l'erreur, harmonique par harmonique et qui aboutit aux mêmes résultats, est appelée méthode de Von Neumann[100]

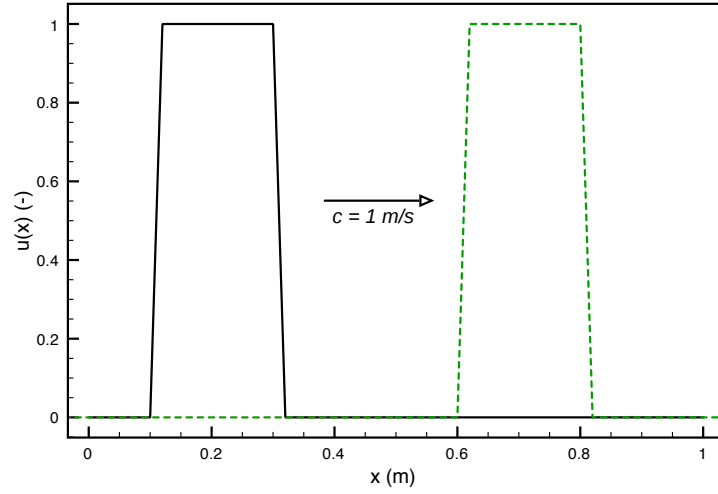


FIG. 5.1 - Transport d'une onde en créneau. La solution en trait pointillé est obtenue après $t = 0.5s$. On note que le profil initial en trait plein a été translaté à la vitesse c .

La solution de (5.13) est : $\hat{u}(k, t) = \hat{u}(k, 0)e^{-ikct}$. Et on peut donc écrire :

$$\frac{\hat{u}(k, t + \Delta t)}{\hat{u}(k, t)} = \exp(-ikc\Delta t) \quad (5.14)$$

ce qui correspond à une convection parfaite à la vitesse c , comme prévu.

Solution avec une semi-discrétisation spatiale - Dissipation et dispersion

Si on reprend la semi-discrétisation (5.3)-(5.4) après application de la transformée de Fourier, on a :

$$\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} + \hat{A} \hat{U} = 0, \quad (5.15)$$

alors la solution est : $\hat{U}(k, t) = \hat{U}(k, 0)e^{-\Re(\hat{A})t}e^{-i\Im(\hat{A})t}$ et donc [254] :

$$\frac{\hat{U}(k, t + \Delta t)}{\hat{U}(k, t)} = \exp(-\Re(\hat{A})\Delta t) \exp(-i\Im(\hat{A})\Delta t) \quad (5.16)$$

Si A est antisymétrique alors la partie réelle de $\hat{A}$ est nulle et la semi-discrétisation est dite non dissipative et conservative au sens de l'énergie (l'amplitude de $\hat{U}$ est constante au cours du temps). Sinon elle est soit **diffusive** ou **dissipative** ($\Re(\hat{A}) > 0$), soit instable ($\Re(\hat{A}) < 0$). La phénomène de dissipation est illustré par la figure 5.2.

La relation de dispersion exacte de l'équation (5.3) est :

$$\boxed{\omega = \Omega(k) = kc} \quad (5.17)$$

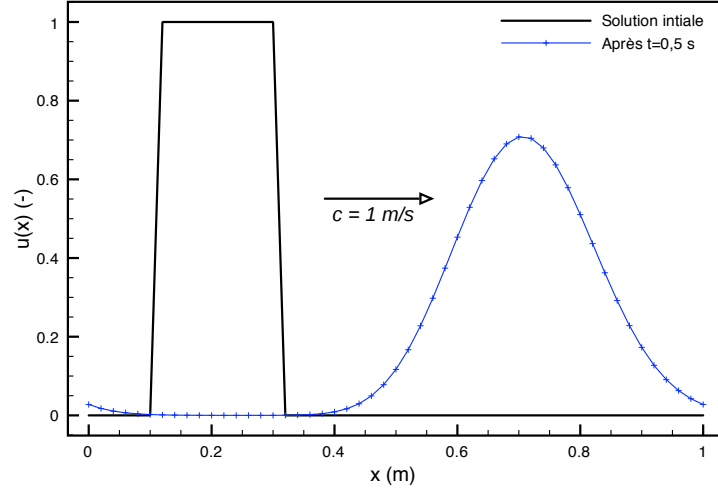


FIG. 5.2 - Mise en évidence de la diffusion (ou dissipation) sur le transport d'une onde en créneau. L'amplitude de l'onde est moins élevée qu'à l'instant initial et les gradients se sont fortement adoucis.

et ω est la pulsation temporelle. La vitesse de phase des ondes est donnée par la relation $c_\phi = \frac{\Omega(k)}{k} = c$ et la vitesse de groupe, correspondant à la vitesse de propagation de l'énergie est : $\mathcal{V}_g = \frac{d\Omega(k)}{dk} = c$ [130]. Celles-ci sont égales et constantes donc les ondes-solutions sont non-dispersives.

La semi-discrétisation (5.3) ne permet pas de retrouver exactement $\Omega(k)$, c_ϕ et $\mathcal{V}_g$. Que la discrétisation soit spatiale ou totale, on peut alors introduire la relation de dispersion d'un schéma numérique [254, 100, 221] :

$$\omega^* = \Omega^*(k) = k c^*(k) = k^*(k) c \quad (5.18)$$

où ω^* , c^* et k^* sont les pulsations, vitesse de phase et nombre d'onde **modifiés**, relatifs au schéma numérique. En utilisant (5.13), (5.15), (5.17) et (5.18), on peut réécrire la relation de dispersion du schéma numérique :

$$\frac{d\hat{U}}{dt} = -i\omega^*\hat{U} = -\hat{A}(k)\hat{U} \quad \text{donc} \quad \omega^* = -i\hat{A}(k)$$

ω^* , k^* et c^* sont des fonctions de k . De plus, ce sont des **grandeurs complexes**, contrairement à ω , k et c qu'on écrira par la suite :

$$\begin{aligned} \omega^* &= \omega_R^* + i \omega_I^* \\ k^* &= k_R^* + i k_I^* \\ c^* &= c_R^* + i c_I^* \end{aligned}$$

En tenant compte de leur lien avec $\hat{A}$ et de l'équation (5.16), on peut expliciter le rôle des parties réelles et imaginaires. Les parties réelles ω_R^* , k_R^* et c_R^* sont équivalentes aux grandeurs physiques auxquelles elles correspondent. Ainsi une oscillation de nombre d'onde k_0 aura une vitesse de phase $c_R^*(k_0)$ dans la simulation. Les parties imaginaires ne sont pas liées au phénomène de propagation de l'oscillation mais à son amplification (dans un cas instable) ou son amortissement (à l'instar du rôle que jouerait une

viscosité). Si $c_I^*(k_0)$ est positive alors l'oscillation est amplifiée.

Si la vitesse de phase c_R^* n'est pas constante en fonction de k , alors les ondes-solutions sont **dispersives** car elles ne se déplacent pas toutes à la même vitesse. Une des conséquences de la dispersion est l'apparition de différentes sortes d'ondulations non physiques (*wiggles*) dans la simulation (voir figure 5.3).

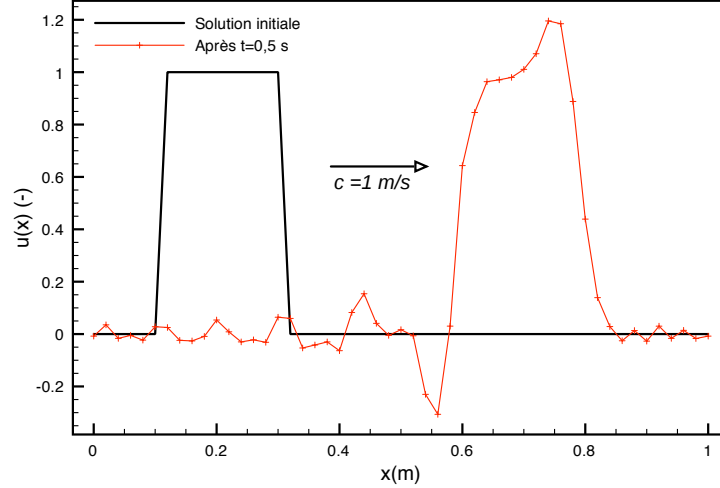


FIG. 5.3 - Mise en évidence de la dispersion sur le transport d'une onde en créneau. Les harmoniques du signal initial ne sont pas toutes transportées à la même vitesse, ce qui fait apparaître des oscillations numériques (*wiggles* ou *ripples*).

Solution avec une discrétisation totale - coefficient d'amplification

On va désormais étudier le cas d'une discrétisation totale et on introduit une notation supplémentaire : $\xi = kh$. En effet, si l'intérêt de la section 5.2.2 est de mettre en évidence les erreurs introduites par les opérateurs spatiaux, la discrétisation temporelle détériore elle aussi la solution et il faut donc aussi la considérer. On utilise l'expression (5.2) à laquelle on applique la transformée de Fourier. On définit alors le coefficient d'amplification :

$$G(k) = \frac{\hat{U}^{n+1}}{\hat{U}^n} = |G(k)| e^{i\phi_G} \quad (5.19)$$

où ϕ_G est l'argument ou phase de G . Par analogie avec les relations (5.14) et (5.16) et en utilisant l'expression (5.18), on peut écrire :

$$G(k) = e^{-ikc^*\Delta t} = e^{-i\omega^*\Delta t} = \underbrace{e^{\omega_I^*\Delta t}}_{\text{module}} \underbrace{e^{-i\omega_R^*\Delta t}}_{\text{phase}} \quad (5.20)$$

ce qui permet de dire que le module du coefficient d'amplification (ou la partie imaginaire de la pulsation) permet de mesurer la dissipation. On va donc chercher à vérifier la **condition de stabilité de Von Neumann**, i.e avoir $|G|$ toujours inférieur ou égal à 1⁴. A partir de l'équation (5.20), on peut écrire la

⁴Dans le cas d'une équation avec terme source, la condition sur $|G|$ est moins restrictive [100] et peut être $|G| \leq 1 + \mathcal{O}(\Delta t)$

relation de dispersion du schéma numérique faisant intervenir le coefficient d'amplification :

$$\omega^* = \Omega^*(k) = -\frac{1}{i\Delta t} \ln G(k) \quad (5.21)$$

L'argument de G permet d'écrire : $\phi_G = -\omega_R^* \Delta t$. De plus, en utilisant les relations (5.18), (5.19) et (5.20), on peut exprimer la vitesse de phase de schéma numérique :

$$\frac{c_R^*}{c} = -\frac{\phi_G}{kc\Delta t} = -\frac{\phi_G}{\nu kh} = -\frac{\phi_G}{\nu \xi} \quad (5.22)$$

où $\nu = c\Delta t/h$ est le CFL. La partie réelle du nombre d'onde est la suivante :

$$k_R^* = -\frac{\phi_G}{\nu h} \quad (5.23)$$

Celle-ci permet d'introduire la vitesse de groupe relative au schéma numérique [100] :

$$\mathcal{V}_g^* = \Re \left\{ \frac{d\Omega^*(k)}{dk} \right\} = c \frac{dk_R^*}{dk} = -\frac{c}{\nu} \frac{d\phi_G}{dkh} = -\frac{c}{\nu} \frac{d\phi_G}{d\xi} \quad (5.24)$$

Les expressions (5.22) et (5.23) seront utilisées pour montrer les effets dispersifs des schémas. Il faut bien rappeler qu'ici c^* , k^* et ω^* sont complexes. En effet, on a : $\omega^* = \omega_R^* + i \omega_I^*$ et la pulsation temporelle d'une oscillation de nombre d'onde k_0 dans un calcul est fournie par la partie réelle $\omega_R^*(k_0)$ (la partie imaginaire étant le taux d'amplification). Une grandeur importante dans la simulation est le nombre d'onde k_c associé à la fréquence de coupure ω_c du schéma, c'est-à-dire la fréquence maximale temporelle qui peut exister dans la simulation numérique (conditions limites mises à part). Pour plus de détails concernant cette grandeur, on renvoie le lecteur aux travaux de Vichnevetsky et Bowles [254] ainsi qu'à la thèse de doctorat de Baum [18]. A l'aide de transformées de Fourier en temps (et non plus en espace), ils caractérisent la transformée de Fourier de l'opérateur E pour plusieurs schémas semi-discrets. Ils mettent ainsi en évidence l'existence de deux types d'ondes-solutions pouvant exister dans la simulation (appelées physiques ou "p" et numériques ou "q") pour une pulsation donnée. Ceci permet de mettre en évidence la fréquence de coupure, ainsi que les conséquences que peut engendrer l'utilisation d'une condition limite "pulsant" à une fréquence supérieure à la fréquence de coupure.

Une définition du nombre d'onde de coupure est aussi donnée par Sengupta [221]. Celui-ci correspond à la valeur maximale que peut avoir k^* , soit :

$$k_c = \max_{0 \leq k \leq \pi} k^* \quad (5.25)$$

dans le cas d'un schéma semi-discret centré, ce qui correspond aussi à une vitesse de groupe nulle. On utilisera cette définition pour des discrétisations totales, avec k_R^* en lieu et place de k^* .

La condition de Von Neumann permet de garantir la stabilité en norme L^2 , la plus importante d'un point de vue pratique, puisqu'elle permet de garantir que la solution reste à "énergie finie". On peut montrer [8] que si $|G(k)| \leq 1 \quad \forall k$ (dans le cas de l'équation de convection) alors le schéma est stable

en norme L^2 (utilisation de la relation de Parseval).

Aliasing - Dissipation au sens de Kreiss

Comme on l'a mentionné précédemment, l'étude de l'équation de convection linéaire s'avère nécessaire pour étudier les caractéristiques des schémas numériques, notamment la précision et la stabilité. Toutefois, elle ne s'avère plus suffisante en général, dès lors que l'équation devient non linéaire. Il existe, en effet, un phénomène appelé *aliasing* [100, 221] dû à la multiplication des variables entre elles. D'après le critère de Nyquist, on ne peut représenter de longueur d'onde plus petite que $2h$, soit $-\pi \leq kh \leq \pi$. Or, en prenant l'exemple du produit de deux variables discrètes U_j et V_j (on fait abstraction de l'exposant temporel), on obtient :

$$\begin{aligned} U_j V_j &= \sum_{p_1} \hat{U}(p_1) e^{2i\pi p_1 x_j} \sum_{p_2} \hat{V}(p_2) e^{2i\pi p_2 x_j} \\ &= \sum_{p_1} \hat{U}(p_1) \left(\sum_{p_2} \hat{V}(p_2) e^{2i\pi p_2 x_j} \right) e^{2i\pi p_1 x_j} \\ &= \sum_{p_1} \sum_{p_2} \hat{U}(p_1) \hat{V}(p_2) e^{2i\pi (p_1 + p_2) x_j} \end{aligned} \quad (5.26)$$

et on a : $|2\pi p_1 x_j| \leq \pi$ et $|2\pi p_2 x_j| \leq \pi$. On voit apparaître des termes en $2\pi(p_1 + p_2)x_j$ et on peut donc avoir $|2\pi(p_1 + p_2)x_j| > \pi$. Ces composantes ne peuvent donc pas être représentées comme des harmoniques ayant des longueurs d'onde inférieures à $2h$. Compte tenu des relations de trigonométrie, elles sont donc représentées comme des harmoniques ayant pour phase $2\pi(1 - (p_1 + p_2)x_j)$ (donc de longueurs d'onde supérieures à $2h$), ce qui signifie que leur énergie a été transférée à d'autres longueurs d'onde (de plus basse fréquence), de manière non physique.

La conséquence est le transfert d'énergie de certains harmoniques à d'autres et notamment des plus petites longueurs d'onde (généralement d'origine non physique - *wiggles*) aux plus grandes. Le résultat peut s'avérer catastrophique et la méthode numérique peut diverger alors même qu'elle est censée être stable d'après l'étude linéaire. Un exemple souvent fourni est le schéma Leap-frog couplé à un schéma centré. Celui-ci, marginalement stable (non dissipatif), devient très instable, dès lors qu'il est utilisé pour simuler des phénomènes non linéaires sans ajout de dissipation artificielle.

Certaines discrétisations (comme les schémas *skew-symmetric* [221]) permettent d'éliminer ce phénomène mais au prix de certaines concessions qui, dans notre cas, ne sont pas acceptables (trop coûteuses ou perte de la conservativité...). L'autre méthodologie, souvent adoptée, est d'être suffisamment dissipatif au sens de Kreiss (la difficulté est de définir le 'suffisamment'). La viscosité artificielle d'ordre 4 est souvent utilisée dans cette optique. La définition de la dissipation de Kreiss est donnée dans [100] :

Définition Un schéma est dissipatif (au sens de Kreiss) d'ordre $2s$, où $s \in \mathbb{N}_*$, s'il existe une constante $\delta > 0$ telle que pour tout vecteur d'onde $\vec{k}$ (avec $k_x h_x, k_y h_y, k_z h_z \leq \pi$), les valeurs propres λ de la matrice d'amplification (NB : qu'on définira plus tard) satisfassent la condition :

$$|\lambda(\vec{x}, \Delta t, \vec{k})| \leq 1 - \delta |\vec{k} \cdot \vec{h}|^{2s}.$$

Cette définition, comme le rappelle Hirsch [100] est une manière de vérifier que, pour $kh = \pi$, le schéma applique une quantité suffisante de dissipation pour éviter tout problème lié aux petites longueurs d'onde, ce qu'on vérifiera pour les schémas d'AVBP.

5.2.3 Méthode de l'équation modifiée ou résolue

Il existe une autre méthode permettant d'étudier les caractéristiques de schémas numériques, ainsi que leurs conditions de stabilité. Elle a été introduite par Warming et Hyett [258] et des travaux, afin de l'améliorer, ont été effectués par Chang [37] et Carpentier [33]. On va rappeler, en outre, le lien fort qui existe entre cette formulation et la méthode de Von Neumann.

Principe

On a montré que résoudre l'équation aux différences (5.7) revient à résoudre, de façon exacte (ici on ne compte pas les erreurs d'arrondis), l'équation :

$$L_{h,\Delta t}(u) = 0 \quad \implies \quad \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = ET_{h,\Delta t} \quad (5.27)$$

Pour pouvoir comparer les schémas entre eux, déterminer leur domaine de stabilité et mettre en avant les erreurs de dissipation et de dispersion, on peut avoir recours à la méthode de Warming et Hyett [258] qui consiste à éliminer toutes les dérivées temporelles de (5.27) (à l'exception de la dérivée du premier ordre) par des dérivées spatiales, en utilisant cette même équation (5.27). Une fois cette *équation modifiée*, on obtient une erreur de troncature ne dépendant plus que de dérivées spatiales et de h (Δt est "caché" dans le CFL ν), ce qui permet de déterminer :

- l'ordre de précision spatial réel du schéma
- les erreurs de diffusion induites par le schéma (dérivées d'ordre pair)
- les erreurs de dispersion (dérivées impaires)
- la stabilité du schéma (les coefficients des dérivées paires doivent être alternativement positifs ou négatifs, une dérivée seconde, s'il y en a une, devant avoir un coefficient positif).

Les erreurs de dispersion et de dissipation sont en particulier bien mises en évidence, lorsqu'on compare l'équation modifiée obtenue à des modèles classiques, bien référencés dans la littérature. Ainsi la semi-discrétisation d'ordre 2 centrée en espace (Δ_0) aura une erreur de troncature de la forme $Ch^2 u_{xxx} + o(h^2)$ (les dérivées d'ordres impairs supérieurs sont non nulles mais négligeables, au moins pour les grandes longueurs d'onde). Le comportement de la solution obtenue est donc très comparable à celui de la solution de l'équation de Korteweg-deVries linéaire (voir [245]), c'est-à-dire très dispersif.

Comme le soulignent Donea et al. [63], cette méthodologie a été développée pour les schémas aux différences finies mais peut être utilisée pour des équations aux différences obtenues via les méthodes des volumes ou des éléments finis. C'est donc ce qu'on va faire. D'un point de vue pratique cependant, la méthodologie est très fastidieuse, dès que le schéma étudié est d'ordre élevé (c'est le cas des schémas TTG), multi-étapes (c'est encore le cas des schémas TTG) et implicite (c'est le cas des schémas TTG en espace). C'est pourquoi, on procède d'une autre façon, en faisant intervenir le coefficient d'amplification d'une manière similaire à Hirsch [100] ou encore Carpentier [33]. On note finalement, que bien

qu'elle soit compliquée à mettre en place, la construction classique de l'équation modifiée a toutefois un avantage, comparée à l'écriture du coefficient d'amplification : elle n'est pas limitée aux problèmes linéaires.

Lien avec le coefficient d'amplification

L'équation modifiée peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = \sum_{p=1}^{+\infty} \left[a_{2p} h^{2p-1} \frac{\partial^{2p} u}{\partial x^{2p}} + a_{2p+1} h^{2p} \frac{\partial^{2p+1} u}{\partial x^{2p+1}} \right] \quad (5.28)$$

et le schéma est d'ordre s quand le premier coefficient est proportionnel h^s [100].

En appliquant la transformée de Fourier à (5.28) et en écrivant la solution de l'équation obtenue, on peut exprimer son coefficient d'amplification (rapport entre la solution à $t = (n+1)\Delta t$ et la solution à $t = n\Delta t$). On a donc $G = f(k, \nu, a_2, a_3, a_4, \dots)$. En utilisant de plus l'expression (5.20), on peut exprimer la pulsation modifiée ω^* , puis la vitesse de phase modifiée c^* en fonction des coefficients a_{2p} et a_{2p+1} de l'erreur de troncature. On obtient, après calcul :

$$c^* = c + \sum_{p=1}^{+\infty} \left[i a_{2p} (-1)^p (kh)^{2p-1} + a_{2p+1} (-1)^{p+1} (kh)^{2p} \right] \quad (5.29)$$

$$= c - i a_2 \xi + a_3 \xi^2 + i a_4 \xi^3 - a_5 \xi^4 + \dots \quad (5.30)$$

On relie c^* quand ξ tend vers zéro aux coefficients de l'erreur de troncature et donc la précision du schéma numérique étudié. Dès lors, on utilisera des développements limités de c^* , autour de $\xi = 0$, **obtenu à partir de G** , pour déterminer les premiers termes de l'équation modifiée.

5.2.4 Application aux schémas d'AVBP

On applique désormais les méthodes vues précédemment aux schémas numériques utilisés dans AVBP. A titre d'indication, les erreurs de troncature associées au schéma aux différences centrées de référence Δ_0 et aux éléments finis de Galerkin (schémas semi-discrets spatiaux) sont [221] :

$$ET_{h,\Delta t}^{\Delta_0} = -\frac{1}{6} ch^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \mathcal{O}(h^4) \quad (5.31)$$

$$ET_{h,\Delta t}^{Galerkin} = \frac{1}{180} ch^4 \frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \mathcal{O}(h^6) \quad (5.32)$$

Lax-Wendroff (LW)

On commence l'analyse avec le schéma LW⁵ car les résultats pour ce schéma sont bien connus [100] et peuvent servir d'illustrations.

Le schéma LW s'écrit de la façon suivante :

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \nu \Delta_0 U_j^n + \frac{1}{2} \nu^2 \delta^2 U_j^n \quad (5.33)$$

En appliquant la méthode de Von Neumann, on obtient :

$$G_{LW}(k) = 1 - i\nu \sin(kh) - \nu^2(1 - \cos(kh)) \quad (5.34)$$

Ce qui permet d'écrire la relation de dispersion pour le schéma LW, lorsque $k \rightarrow 0$:

$$\Omega_{LW}^*(k) = kc - \frac{ch^2}{6}(1 - \nu^2)k^3 - i\frac{ch^3}{8}\nu(1 - \nu^2)k^4 + \mathcal{O}(k^5) \quad (5.35)$$

On en déduit l'erreur de troncature et donc l'équation résolue, lorsque le schéma LW est utilisé :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{ch^2}{6}(1 - \nu^2) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} - \frac{ch^3}{8}\nu(1 - \nu^2) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \mathcal{O}(h^4) \quad (5.36)$$

De par sa construction, on sait que le schéma de LW est d'ordre 2 en temps, l'erreur de troncature montre qu'il est aussi d'ordre 2 en espace. Une propriété intéressante est que la discrétisation devient 'parfaite' pour $\nu = 1$. En pratique, on ne peut utiliser cette caractéristique (les erreurs d'arrondis provoqueraient la divergence du calcul), mais il convient toutefois de l'indiquer.

Schéma Runge-Kutta 3 - différences centrées (RK3-CV)

Sur un maillage régulier monodimensionnel, le schéma *cell-vertex* "de base" devient la discrétisation centrée d'ordre 2 classique (opérateur Δ_0), à l'instar de tous les volumes finis centrés en espace. Celle-ci est souvent étudiée dans la littérature [254, 221]. Son symbole $\hat{A}$ étant purement imaginaire, elle est non dissipative, mais en revanche est très dispersive pour les petites longueurs d'onde. Utilisée avec la méthode de Runge-Kutta à 3 étapes comme dans AVBP, la discrétisation totale est la suivante :

$$U_j^{n+1} = \sum_{m=0}^3 \frac{(-\nu \Delta_0)^m}{m!} U_j^n \quad (5.37)$$

$$= U_j^n - \nu \Delta_0 U_j^n + \frac{1}{2} \nu^2 (\Delta_0)^2 U_j^n - \frac{1}{6} \nu^3 (\Delta_0)^3 U_j^n \quad (5.38)$$

⁵le schéma *cell-vertex* sur maillage monodimensionnel régulier est équivalent au schéma classique obtenu avec la méthode des différences finies

Le coefficient d'amplification de la méthode (5.37) est le suivant :

$$G_{RK3CV}(k) = 1 - i\nu \sin(kh) - \frac{1}{2}\nu^2 \sin^2(kh) - i\frac{1}{6}\nu^3 \sin^3(kh) \quad (5.39)$$

donc :

$$\Omega_{RK3CV}^*(k) = kc - \frac{ch^2}{6} k^3 - i \frac{ch^3}{24} \nu^3 k^4 + \mathcal{O}(k^5) \quad (5.40)$$

ce qui donne pour l'équation résolue :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{ch^2}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} - \frac{ch^3}{24} \nu^3 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \mathcal{O}(h^4) \quad (5.41)$$

Ce schéma est par construction d'ordre 3 en temps et l'équation (5.41) indique qu'il est d'ordre 2 en espace. Par ailleurs, on note que l'erreur de dispersion d'ordre 3 ne dépend pas du pas de temps choisi (pas de dépendance en CFL).

Schéma Euler-Taylor-Galerkin (ETG)

L'expression du schéma ETG en 1D sur un maillage régulier fait intervenir une matrice de masse M et s'écrit :

$$U_j^{n+1} = U_j^n - M_{ETG}^{-1} \left(\nu \Delta_0 U_j^n + \frac{1}{2} \nu^2 \delta^2 U_j^n \right) \quad (5.42)$$

et : $M_{ETG} = M - \frac{1}{6} \nu^2 \delta^2$. La présence de M_{ETG}^{-1} rappelle qu'il s'agit d'un schéma implicite. Le coefficient d'amplification du schéma est donc le suivant :

$$G_{ETG}(k) = 1 - \left(i\nu \sin(kh) + 2\nu^2 \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \right) \left(1 - \frac{2}{3}(1 - \nu^2) \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \right)^{-1} \quad (5.43)$$

La relation de dispersion pour le schéma ETG s'écrit :

$$\Omega_{ETG}^*(k) = kc - i \frac{ch^3}{24} \nu(1 - \nu^2) k^4 - \frac{ch^4}{180} (4\nu^4 - 5\nu^2 + 1) k^5 + \mathcal{O}(k^5) \quad (5.44)$$

et l'équation résolue avec le schéma ETG est la suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{ch^3}{24} \nu(1 - \nu^2) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{ch^4}{180} (4\nu^4 - 5\nu^2 + 1) \frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \mathcal{O}(h^5) \quad (5.45)$$

Clairement, on obtient une nette amélioration par rapport au schéma Lax-Wendroff. En effet, l'erreur de dispersion d'ordre 3 a disparu. Le schéma est donc précis à l'ordre 3 en espace et en temps. Il a, de plus, la même propriété que le schéma Lax-Wendroff à CFL unitaire.

Schémas TTG

Les schémas TTG s'expriment en deux étapes. Sur un maillage monodimensionnel régulier, on les écrit :

$$\tilde{U}_j^n = U_j^n - M^{-1} (\alpha \nu \Delta_0 U_j^n - \beta \nu^2 \delta^2 U_j^n) \quad (5.46)$$

$$U_j^{n+1} = U_j^n - M^{-1} \left(\nu (\theta_1 \Delta_0 U_j^n + \theta_2 \Delta_0 \tilde{U}_j^n) - \nu^2 (\epsilon_1 \delta^2 U_j^n + \epsilon_2 \delta^2 \tilde{U}_j^n) \right) \quad (5.47)$$

Ces schémas étant à 2 étapes, on va donc aussi écrire deux coefficients d'amplification, le second étant le coefficient global et étant fonction du premier.

$$\tilde{G}_{TTG}(k) = 1 - \left(i \alpha \nu \sin(kh) + 4\beta \nu^2 \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \right) \left(1 - \frac{2}{3} \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \right)^{-1} \quad (5.48)$$

$$\begin{aligned} G_{TTG}(k) &= 1 - \left[i \nu \left(\theta_1 \sin(kh) + \theta_2 \sin(kh) \tilde{G}(k) \right) \right. \\ &\quad \left. - \nu^2 \left(4\epsilon_1 \nu^2 \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) + 4\epsilon_2 \nu^2 \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \tilde{G}(k) \right) \right] \left(1 - \frac{2}{3} \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \right)^{-1} \end{aligned} \quad (5.49)$$

On peut désormais écrire les relations de dispersion correspondant aux schémas codés dans AVBP.

$$\Omega_{TTG3}^*(k) = kc - i \frac{ch^3}{72} \nu (3 - \nu^2) k^4 - \frac{ch^4}{180} (4\nu^4 - 5\nu^2 + 1) k^5 + \mathcal{O}(k^5) \quad (5.50)$$

$$\Omega_{TTG4A}^*(k) = kc - i \frac{ch^3}{24} \nu k^4 - \frac{ch^4}{360} (3\nu^4 - 10\nu^2 + 2) k^5 + \mathcal{O}(k^5) \quad (5.51)$$

$$\begin{aligned} \Omega_{TTGC(\gamma)}^*(k) &= kc - i \frac{ch^3}{24} \nu (\nu^2 - 2\gamma) k^4 \\ &\quad + \frac{ch^4}{360} (12\nu^4 + (30\gamma - 5)\nu^2 - 2) k^5 + \mathcal{O}(k^5) \end{aligned} \quad (5.52)$$

et on en déduit les équations résolues par les schémas TTG⁶ :

⁶On rappelle que le paramètre γ pour TTGC correspond à ϵ_1 dans la formulation TTG générale.

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} &= -\frac{ch^3}{72}\nu(3-\nu^2)\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \\ &+ \frac{ch^4}{180}(4\nu^4 - 5\nu^2 + 1)\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \mathcal{O}(h^5) \quad (\text{TTG3}) \end{aligned} \quad (5.53)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} &= -\frac{ch^3}{24}\nu\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \\ &+ \frac{ch^4}{360}(3\nu^4 - 10\nu^2 + 2)\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \mathcal{O}(h^5) \quad (\text{TTG4A}) \end{aligned} \quad (5.54)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} &= -\frac{ch^3}{24}\nu(\nu^2 - 2\gamma)\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \\ &- \frac{ch^4}{360}(12\nu^4 + (30\gamma - 5)\nu^2 - 2)\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \mathcal{O}(h^5) \quad (\text{TTGC}) \end{aligned} \quad (5.55)$$

Les schémas TTG présentés ici sont donc d'ordre 3 en espace. D'autre part, par construction, on rappelle qu'ils sont aussi d'ordre 3 en temps (sauf TTG4A qui est d'ordre 4 en temps - voir section 4.6). La caractéristique première des schémas Taylor-Galerkin (on inclut ETG ici) est bien la diminution significative de l'erreur de dispersion très présente pour les schémas d'ordre 2, tout en maintenant un niveau de dissipation numérique globalement très faible. On notera que le paramètre γ a un rôle primordial sur le comportement du schéma TTGC(γ). Le choix de γ s'est porté sur 0.01 [47]. Le schéma obtenu est très peu dissipatif. En effet, γ contrôle la dissipation. Pour une valeur de 0.5, le schéma ne dissipe quasiment pas, il devient instable si $\gamma < 0$ (le module du coefficient d'amplification devient plus grand que 1).

On va présenter les résultats obtenus à l'aide d'un code écrit afin de calculer les coefficients d'amplification présentés précédemment. Les comparaisons entre les schémas se feront à différents CFL (0.1, 0.3, 0.5 et 0.7). Dans cette section, on ne présentera les résultats que pour la partie des kh positifs ($|G|$ étant paire et ϕ_G impaire).

5.2.5 Diffusion ou Dissipation

La dissipation du schéma numérique est fournie par le module du coefficient d'amplification $|G|$ et correspond à une **erreur en amplitude**. On garde à l'esprit la notion de dissipation selon Kreiss donc pour tous les schémas, on regarde en particulier la valeur $|G(\pi)|$.

Les figures 5.4 à 5.6 indiquent la dissipation introduite par les différents schémas étudiés et la figure 5.7 présente une comparaison à un CFL donné (0.3 ici) entre tous les schémas étudiés et quelques schémas centrés de référence (différences finies explicites et compactes).

Il est clair que les schémas basés sur une discrétisation temporelle de type Taylor-Galerkin (LW, ETG, TTG3, TTG4A) sont plus dissipatifs que les autres (à l'exception de TTGC qui présente des performances très proches d'un schéma compact d'ordre 6), ce qui est attendu vu la construction de ces schémas (dérivées spatiales d'ordre 2 introduites). Pour une application comme une simulation aux grandes échelles, la question est donc de savoir si la diffusion engendrée par le schéma n'est pas trop importante et ne dégrade pas la diffusion physique (et en particulier ne dégrade pas le transfert d'énergie entre les différentes échelles de la turbulence). Sur ce point, les avis restent partagés. Dans [47], Colin et Rudgyard montrent que seul le schéma TTGC répond aux exigences d'une simulation aux grandes échelles, voire d'une simulation numérique directe. Il a été construit pour avoir les qualités

des schémas Taylor-Galerkin en terme de dispersion (on le verra après), mais aussi et surtout pour dissiper beaucoup moins. En particulier les schémas LW, ETG et TTG4A s'avèrent trop dissipatifs dans des simulations directes de turbulence homogène isotrope décroissante (voir les spectres d'énergie turbulente et d'ensrophie dans [47]).

On peut contrebalancer cet argument avec plusieurs remarques :

- Le CFL de référence pour les équations de Navier-Stokes est le CFL acoustique. Or le CFL convectif est souvent 10 à 100 fois inférieur au CFL acoustique. En effet, on peut écrire le lien entre les deux CFL sur un maillage monodimensionnel régulier :

$$\nu_{acous} = \frac{(u+c)\Delta t}{h} = \frac{u\Delta t}{h} \left(1 + \frac{1}{M}\right) = \nu_{conv} \left(1 + \frac{1}{M}\right)$$

$$\Rightarrow \nu_{conv} = \underbrace{\frac{M}{M+1}}_{\sim 0.1 \text{ pour } M=0.1} \nu_{acous}$$

Pour ces valeurs, tous les schémas sont quasiment équivalents et très performants sur une grande plage de fréquence (à CFL égal à 0.1, les performances sont déjà très satisfaisantes). Donc, la dégradation du phénomène de diffusion par les schémas convectifs n'est pas aussi importante.

- Un schéma doit dissiper aux petites échelles. Or la figure 5.6 met en évidence le fait que TTGC est très peu dissipatif au sens de Kreiss car $|G(\pi)| > 0.9$ pour tous les CFL, contrairement aux autres schémas Taylor-Galerkin. Ceci explique pourquoi le schéma TTGC manque de robustesse, dès qu'il est utilisé pour des problèmes non linéaires, à l'instar de tous les schémas centrés (hors Lax-Wendroff/Taylor-Galerkin). Il nécessite alors l'utilisation de viscosité d'ordre 4, de façon quasi-systématique, avec des valeurs de $\epsilon^{(4)}$ toujours bien plus élevées que pour les autres schémas.

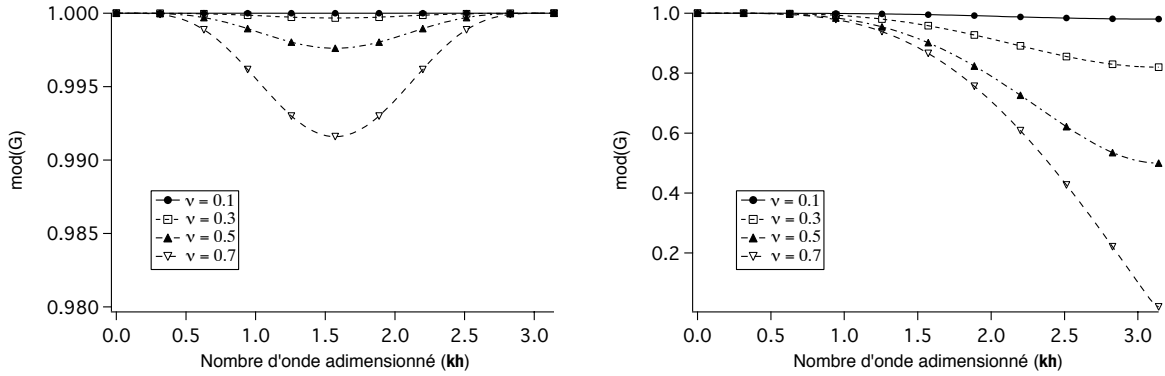


FIG. 5.4 - Dissipation numérique introduite par le schéma RK3-CV (à gauche) et le schéma LW (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

Stabilité

Bien qu'on puisse le faire de manière analytique pour les schémas les plus simples, on emploie une méthode numérique pour déterminer le critère de stabilité (nombre CFL limite) pour tous les schémas. Le principe consiste à utiliser le code de calcul qui a permis de tracer les figures précédentes ($|G|$, k^* ...) et l'utiliser pour calculer $|G|$ sur une plage de CFL suffisamment large (typiquement de 0 à 2 ou 3) et

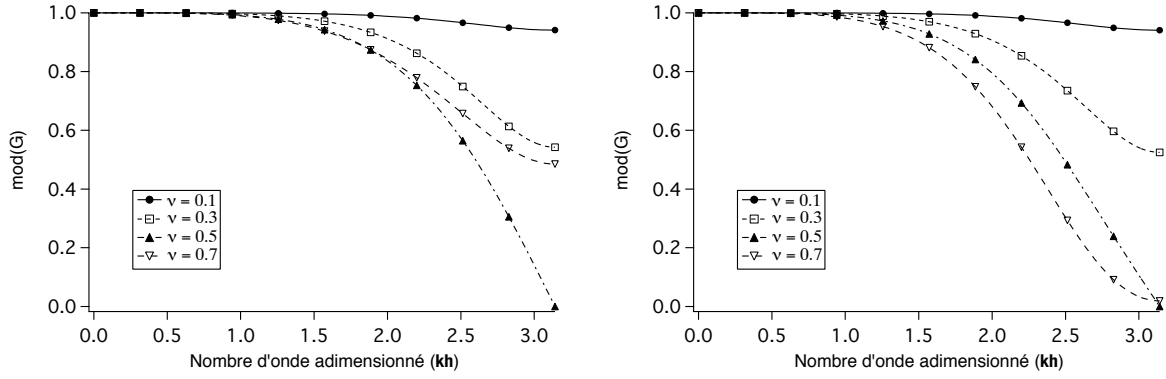


FIG. 5.5 - Dissipation numérique introduite par le schéma ETG (à gauche) et le schéma TTG3 (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

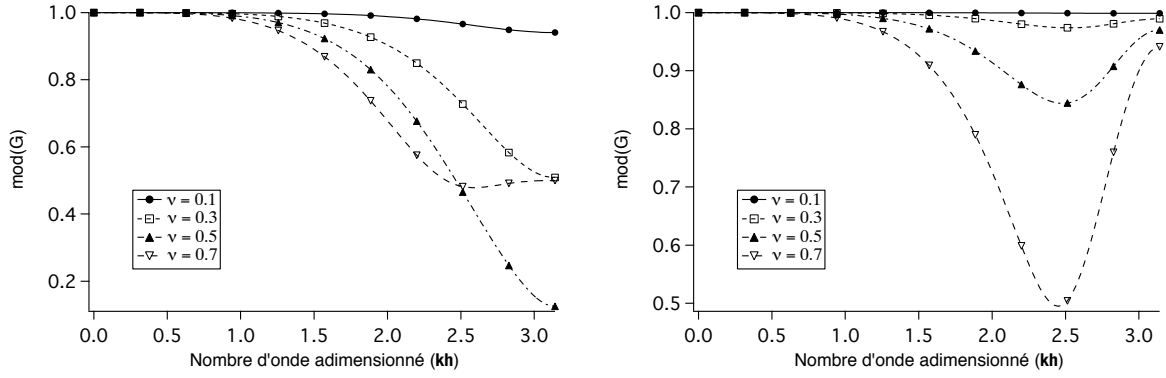


FIG. 5.6 - Dissipation numérique introduite par le schéma TTG4A (à gauche) et le schéma TTGC (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

discrétisée (pas de 0.01 en général) et chercher pour chaque CFL $\max_{kh} |G|$. Dès que celui-ci dépasse 1 strictement, on connaît le CFL limite ν_c .

Le tableau 5.1 indique les domaines de stabilité pour les schémas d'AVBP.

Schéma	ν_c
RK3-CV	$\sqrt{3}$
LW	1
ETG	1
TTG3	$\sqrt{\frac{3}{4}}$
TTG4A	1
TTGC(0.01) [47]	1.022

TAB. 5.1 - Domaine de stabilité des schémas étudiés. ν_c est le CFL critique.

Dispersion

L'étude de la dispersion va permettre de s'intéresser à la vitesse de propagation des ondes et de l'énergie en fonction du nombre d'onde. L'information est fournie par la phase du coefficient d'amplif-

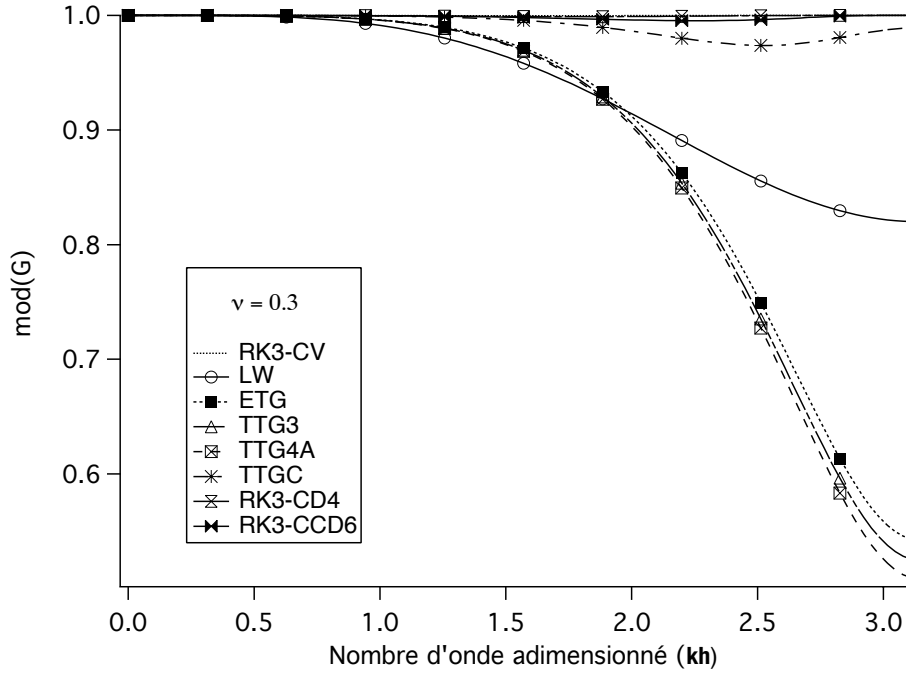


FIG. 5.7 - Comparaison de la dissipation numérique relative à différents schémas. Le CFL est égal à 0.3. Des schémas de référence comme les schémas centrés d'ordre 4 explicite et le schéma compact de Padé du 6ème ordre ont été ajoutés pour compléter la comparaison.

cation. La dispersion des ondes résulte de l'**erreur de phase** réalisée par le schéma numérique qui varie en fonction de la longueur d'onde. Les oscillations sont transportées à des vitesses erronées et surtout différentes en fonction de k , d'où la possible dispersion des différents harmoniques d'un paquet d'ondes.

Vitesse de phase - Nombre d'onde modifié On peut étudier la dispersion à l'aide de la vitesse de phase et le nombre d'onde modifié⁷. A la manière de Vichnevetsky [254], Lele [125] et Sengupta [221], on choisit d'étudier la partie réelle du nombre d'onde modifié adimensionnalisé $k_R^* h$. Les figures 5.8 à 5.10 indiquent la dispersion générée par les différents schémas étudiés et la figure 5.12 présente une comparaison à un CFL donné (0.3 ici) entre tous les schémas étudiés et quelques schémas centrés de référence (différences finies explicites et compactes).

Les schémas Lax-Wendroff / Taylor-Galerkin avaient comme défaut de dissiper plus que les schémas centrés classiques. En revanche, en ce qui concerne les erreurs de dispersion, les premiers sont bien plus performants, en particulier lorsque le CFL augmente⁸. Le schéma RK3-CV a une dispersion quasi-constante par rapport au CFL (ce que laisse apparaître le terme en h^2 de son erreur de troncature, équation (5.41)). Les courbes de nombre d'onde modifié étant sous la courbe kh idéale, on en déduit que la vitesse de phase des ondes est inférieure à c (retard de phase). Concrètement, cela se traduit par l'apparition d'oscillations numériques, plus 'lentes' que les ondes physiques (et donc apparaissant dans leurs sillages). A noter, que les oscillations qu'on peut rencontrer près de discontinuités sont dues

⁷Ici on parle en réalité de la partie réelle de ces grandeurs, la partie imaginaire étant relative à la dissipation.

⁸Les schémas LW et ETG ont une propriété très intéressante : à CFL unitaire, leur erreur de troncature est nulle, le schéma résout exactement l'équation (5.1)

généralement au phénomène de Gibbs⁹ et non pas à la dispersion, qui peut cependant aggraver ses effets néfastes [165].

Le gain d'un ordre des schémas Taylor-Galerkin apparaît nettement : l'erreur principale de dispersion des schémas d'ordre 2 (dérivée d'ordre 3) a disparu, ce dont témoignent les figures 5.8 à 5.10. La résolution spectrale est en effet bien meilleure que pour RK3-CV et LW (la fonction k_R^*h approxime bien mieux la fonction kh de référence). On note, en outre, figure 5.9 que les schémas ETG et TTG3 ont une erreur de dispersion quasiment nulle à CFL égal à 0.5. TTGC étant moins dissipatif que les autres schémas de la même famille, il n'est pas étonnant de noter que son erreur de dispersion est légèrement supérieure (l'effet n'est toutefois pas très sensible en pratique).

Par ailleurs, on peut faire une remarque concernant la nature de la dispersion des ondes pour les schémas Taylor-Galerkin. On note qu'à partir d'une certaine valeur de CFL (typiquement environ 0.5 sauf pour TTGC qui change à un CFL d'environ 0.8-0.85), $k_R^* > k$. Cela signifie que les schémas sont en avance de phase et cela a une conséquence sur la nature de la propagation de l'énergie, comme on le verra après.

Enfin, en étudiant les figures 5.11 et 5.12, on note que les schémas Taylor-Galerkin ont une erreur de dispersion extrêmement proche du schéma compact d'ordre 6, ce qui met en évidence une fois encore la qualité de cette famille de schémas.

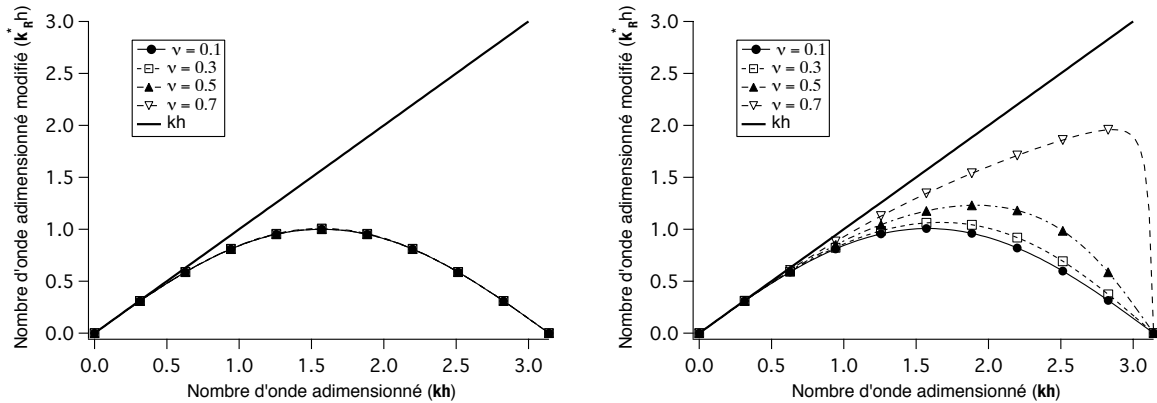


FIG. 5.8 - Parties réelles des nombres d'ondes modifiés adimensionnés des schémas RK3-CV (à gauche) et LW (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

Résolution spectrale La notion de résolution spectrale est très liée aux qualités en termes d'erreur de phase d'un schéma numérique et définit la capacité d'un schéma à résoudre correctement une grande variété d'échelles. Elle est déterminée par la valeur du nombre d'onde de coupure, non pas tel que Nyquist le définit, mais en tenant compte de $k_c = \max_k k_R^*$. Cette valeur est directement liée à la plus haute fréquence temporelle qui peut apparaître dans un calcul : $\omega_c = k_c c$.

Les figures 5.8 à 5.10 et 5.11 mettent clairement en évidence les grandes qualités des schémas Taylor-Galerkin en termes de résolution. En effet, ceux-ci sont clairement supérieurs à tous les autres schémas (y compris un schéma centré du quatrième ordre, censé être plus précis !), à l'exception du schéma de Padé d'ordre 6 avec lequel ils partagent l'implicitation en espace. Il faut toutefois souligner que le

⁹Le phénomène de Gibbs provient de la discrétisation et donc de la troncature des très hautes fréquences dans le spectre de la solution.

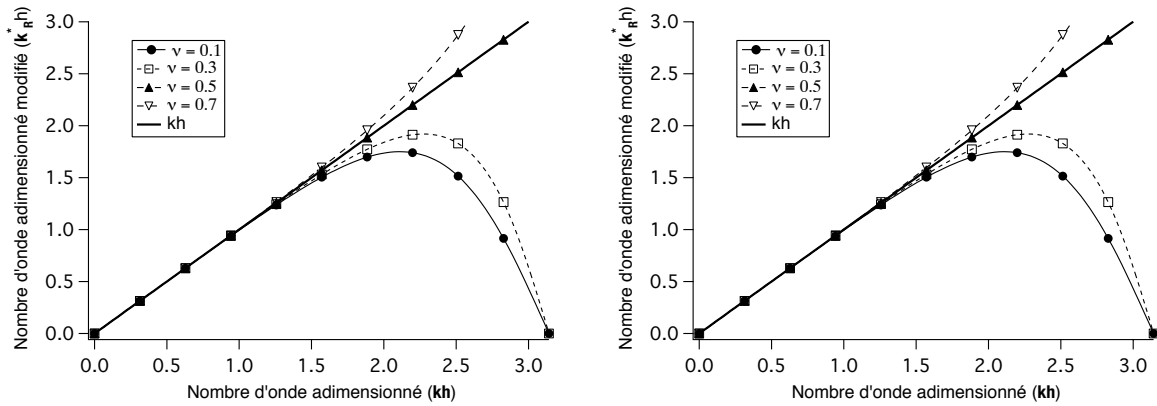


FIG. 5.9 - Parties réelles des nombres d'ondes modifiés adimensionnés des schémas ETG (à gauche) et TTG3 (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

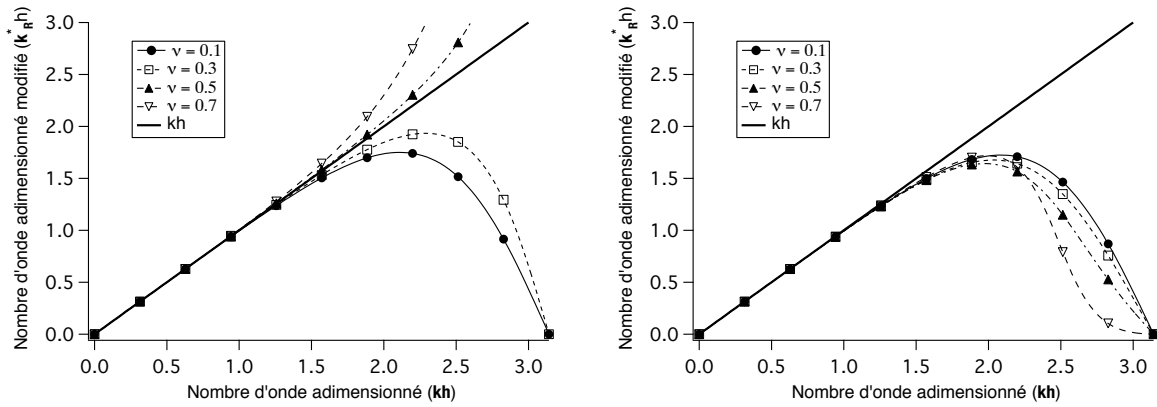


FIG. 5.10 - Parties réelles des nombres d'ondes modifiés adimensionnés des schémas TTG4A (à gauche) et TTGC (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

schéma de Padé est à peine meilleur que les schémas Taylor-Galerkin (la différence se fait en réalité sur la dissipation) pour un CFL de 0.3¹⁰.

Schéma	$k_c h$
RK3-CV	1.00
LW	1.065
ETG	1.92
TTG3	1.92
TTG4A	1.935
TTGC(0.01) [47]	1.675

TAB. 5.2 - Résolution spectrale des différents schémas étudiés. $k_c = \max_k k_R^*$ est le nombre d'onde critique ou de coupure (le CFL est de 0.3).

¹⁰Le schéma de Padé a des performances quasi-indépendantes du CFL choisi en ce qui concerne la dispersion, puisque celle-ci est majoritairement due à la discrétisation spatiale.

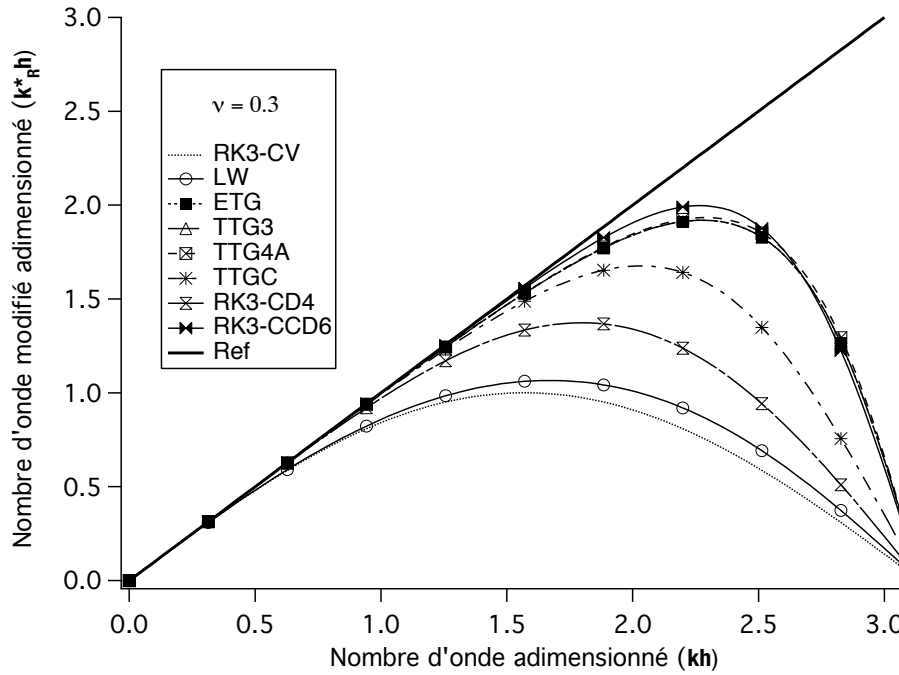


FIG. 5.11 - Comparaison des parties réelles des nombres d'ondes modifiés adimensionnés des différents schémas. Le CFL est égal à 0.3. Des schémas de référence comme les schémas centrés d'ordre 4 explicite et le schéma compact de Padé du 6ème ordre ont été ajoutés pour compléter la comparaison.

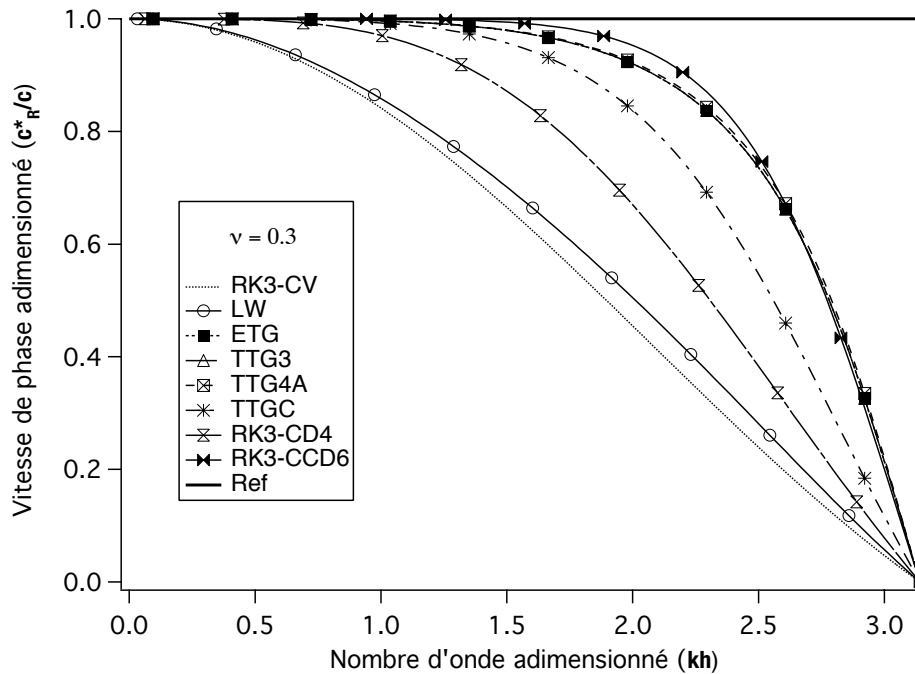


FIG. 5.12 - Comparaison de la vitesse de phase adimensionnée des différents schémas. Le CFL est égal à 0.3. Des schémas de référence comme les schémas centrés d'ordre 4 explicite et le schéma compact de Padé du 6ème ordre ont été ajoutés pour compléter la comparaison.

Etude de la DRP - Vitesse de groupe Le concept de DRP (*dispersion relation preservation* ou préservation de la relation de dispersion) a été introduit par Tam et Webb [241]. Le but de ces derniers est de concevoir un schéma numérique respectant la relation de dispersion physique $\omega = \Omega(k)$ sur la plus grande plage de k possible, même si cela doit se faire au détriment de l'ordre de convergence. Sengupta (toujours lui !) [221] souligne l'importance, pour un schéma de convection (donc utilisé pour la propagation d'ondes), de respecter au maximum cette propriété.

L'étude de la DRP revient à étudier la vitesse de groupe d'un paquet d'ondes de fréquence autour de k . Un schéma est d'autant plus performant que la vitesse de groupe des ondes fournie par celui-ci, correspond à la vitesse de groupe réelle. Les figures 5.13 et 5.14 indiquent les vitesses de groupes des paquets d'ondes, en fonction du nombre d'onde. Le tableau 5.3 indique le nombre d'onde à partir duquel l'erreur sur la vitesse de groupe est supérieure à 5%. Une observation des schémas centrés permet de rappeler quelques résultats classiques qu'on peut trouver dans [254, 100, 18, 221] : les ondes de longueur inférieure à une certaine valeur ont une vitesse de groupe négative ! Pour un schéma centré d'ordre 2, on a par exemple :

$$\mathcal{V}_g^*(\lambda = 4h) = 0 \quad \text{et} \quad \mathcal{V}_g^*(\lambda = 2h) = -c.$$

$\mathcal{V}_g^*$ correspond à la vitesse de transport de l'énergie [130], cela signifie donc que toute l'énergie, contenue dans cette partie du spectre, sera convectée dans la direction opposée à ce qu'indique la physique ! Comme la vitesse de groupe est une notion liée à la dispersion, il n'est pas étonnant de voir, qu'une fois encore, les schémas Taylor-Galerkin offrent de très bons résultats. Pour un CFL de 0.7 (figure 5.14), on note quelques résultats intéressants :

- Le schéma LW a un comportement bien plus satisfaisant que le schéma aux différences centrées (plus le CFL est élevé, plus cette affirmation se confirme, en fait).
- Le schéma TTGC n'a pas le même comportement que les autres schémas de la même famille. L'erreur de dispersion étant à retard de phase, il n'est pas surprenant de voir qu'à partir d'une certaine valeur (aux alentours de $\lambda = \pi h$), la vitesse de groupe devient négative. Par ailleurs, celle-ci tend vers zéro quand $kh \rightarrow \pi$. Cela signifie que les *wiggles* avec $\lambda = 2h$ sont immobiles !
- Les autres schémas Taylor-Galerkin sont en avance de phase pour les hautes fréquences à partir d'un CFL aux alentours de 0.5. Par conséquent, les *wiggles* ont une vitesse de propagation qui, si elle n'est pas juste, est au moins positive.

L'intérêt de connaître les vitesses de groupe des ondes, et en particulier des *wiggles*, est aussi lié au comportement des schémas face aux variations de taille de maille ou près des bords [35]. En effet, Vichnevetsky [254] a montré que la sortie d'une onde "physique" (onde p) du domaine de calcul peut induire une réflexion (qui n'est évidemment pas physique). La même chose peut se produire lorsqu'une onde p atteint une variation importante de taille de maille. L'onde réfléchie est alors une onde "numérique" (onde q) de même pulsation ω_R^* mais de longueur environ égale à $2h$. Le coefficient de réflexion est intimement lié à la vitesse de groupe. Ainsi, on peut imaginer que si les *wiggles* ont aussi une vitesse de groupe positive, il n'y aura pas de réflexion numérique au niveau d'une sortie. Ce raisonnement tend donc à avantager les schémas Taylor-Galerkin par rapport aux autres, lorsque le CFL est suffisamment élevé.

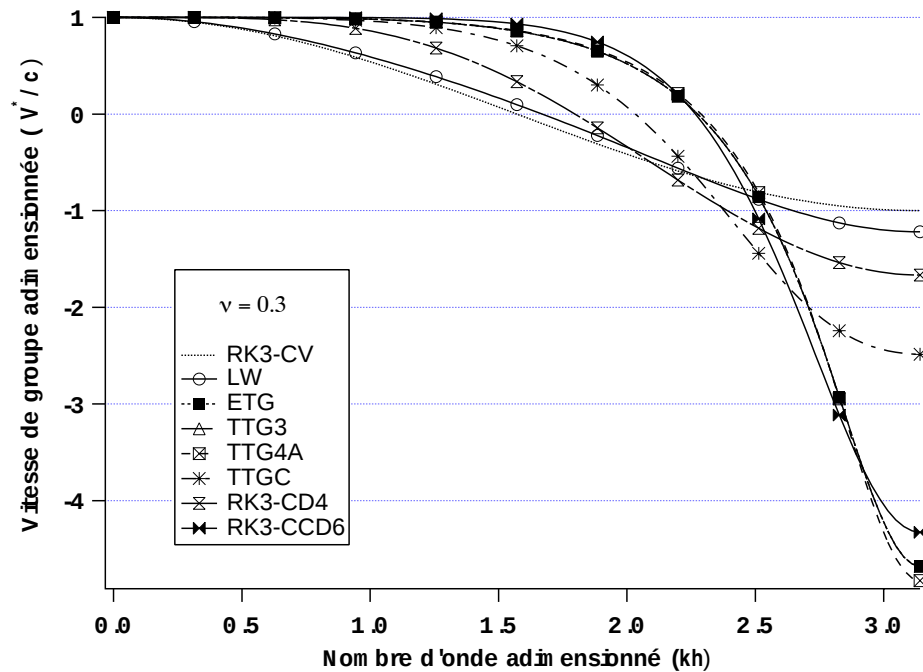


FIG. 5.13 - Comparaison des vitesses de groupe relatives à différents schémas. Le CFL est égal à 0.3. Des schémas de référence comme les schémas centrés d'ordre 4 explicite et le schéma compact de Padé du 6ème ordre ont été ajoutés pour compléter la comparaison.

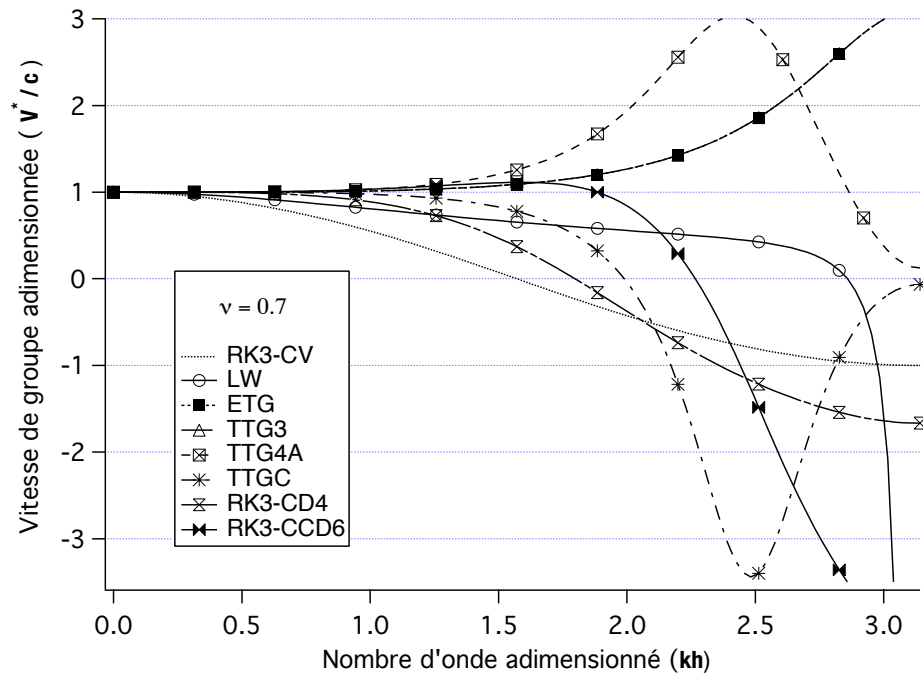


FIG. 5.14 - Comparaison des vitesses de groupe relatives à différents schémas. Le CFL est égal à 0.7. Des schémas de référence comme les schémas centrés d'ordre 4 explicite et le schéma compact de Padé du 6ème ordre ont été ajoutés pour compléter la comparaison.

Schéma	kh pour $\nu = 0.3$	λ pour $\nu = 0.3$	kh pour $\nu = 0.7$	λ pour $\nu = 0.7$
RK3-CV	0.32	19.64 h	0.32	19.64 h
LW	0.33	19.02 h	0.46	13.66 h
ETG	1.25	5.03 h	1.37	4.59 h
TTG3	1.25	5.03 h	1.37	4.59 h
TTG4A	1.265	4.97 h	1.099	5.72 h
TTGC(0.01) [47]	1.06	5.93 h	1.17	5.37 h

TAB. 5.3 - Nombres d'onde (et longueurs d'onde correspondantes) à partir desquels $\mathcal{V}_g^* > 1.05$ ou $\mathcal{V}_g^* < 0.95$.

5.3 Cas multidimensionnels

L'analyse présentée précédemment peut être généralisée aux cas multidimensionnels. Le principe est similaire et la construction du coefficient d'amplification, quoique fastidieuse, ne pose pas de difficulté particulière. On se limite donc aux cas bidimensionnels. L'intérêt est, avant tout, de mettre en avant le caractère parfois très anisotrope des méthodes numériques employées, ainsi que l'impact du passage de une à deux dimensions sur les limites du domaine de stabilité. Ici, l'étude se restreint aux **maillages formés de carrés de côté h** .

Dans l'étude présentée ici, on fait l'hypothèse suivante :

Hypothèse Le gradient de la phase $\Phi(x, t)$ du paquet d'onde considéré est colinéaire au vecteur vitesse $\vec{c}$, soit :

$$\vec{\nabla}\Phi // \vec{c}$$

Ce type d'étude est souvent réalisé et on retrouve des exemples dans [254, 63]. Il existe toutefois d'autres types d'études multidimensionnelles comme celle qu'on peut trouver dans la thèse de Rudgyard [200]. Cette dernière est plus complète mais demeure moins évidente à analyser, vis à vis des points qu'on cherche, ici, à mettre en évidence.

5.3.1 Anisotropie

On introduit de nouvelles notations :

- k_x et k_y sont les nombres d'onde dans les directions Ox et Oy .
- α est l'angle entre l'axe des abscisses Ox et le vecteur vitesse s'écrit $\vec{c} = (c \cos \alpha, c \sin \alpha)^T$ et donc $k_x = k \cos \alpha$ et $k_y = k \sin \alpha$.

On construit ainsi les coefficients d'amplification $G(k, \alpha)$ en suivant la même procédure que celle décrite pour les cas monodimensionnels, section 5.2. Les figures 5.16 à 5.19 indiquent les modules des coefficients d'amplification $|G(k, \alpha)|$ et les vitesses de phase adimensionnées $c_R^*(k, \alpha) = -\frac{\phi_G(k, \alpha)}{\nu kh}$ des schémas RK3-CV, LW, TTGC et TTG4A pour des CFL de 0.3 et 0.7. Ces graphes sont en coordonnées polaires ($|G|, \alpha$) ou $(c_R^*/c, \alpha)$. La figure 5.15 résume le principe des graphes qu'on présente par la suite. Chaque courbe, représentant le module ou la vitesse de phase, est tracée pour un nombre d'onde k (donc une longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$) fixé. On choisit de donner $|G|$ et c_R^*/c pour les longueurs d'onde : $2h$, $3h$, $4h$, $8h$ et pour une grande longueur d'onde (bien résolue et qu'on considère comme tendant vers l'infini).

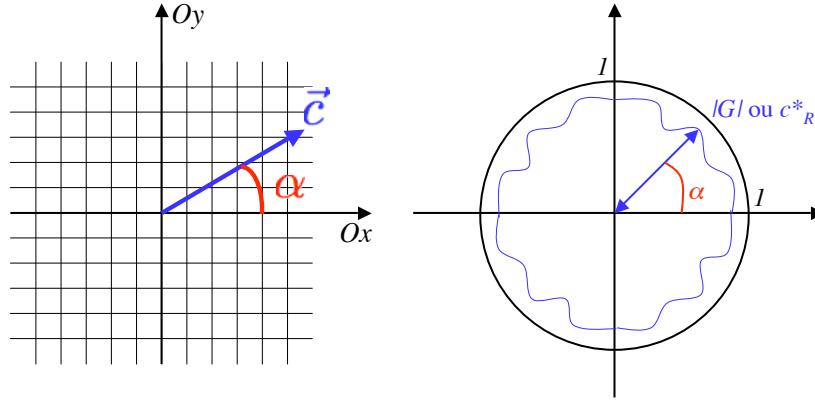


FIG. 5.15 - Définition de l'angle α par rapport au maillage (à gauche) et construction du graphe permettant d'étudier le module ou la vitesse de phase à un nombre d'onde fixé, en fonction de α .

Pour les grandes longueurs d'onde, tous les schémas sont isotropes et les caractéristiques en termes de dissipation et dispersion sont sensiblement les mêmes qu'en 1D, comme on les a décrites précédemment. En revanche, pour des longueurs d'onde inférieures ou égales à $4h$, les défauts apparaissent bien plus clairement. Les remarques principales sont les suivantes :

- Le schéma LW *cell-vertex* ne dissipe pas ou peu les wiggles $2h$ dans les directions diagonales (d'où les wiggles en damier qui apparaissent dans beaucoup de calculs). De plus, l'erreur de dispersion est très grande dans ce cas.
- LW *cell-vertex* a des performances plus intéressantes dans les directions principales du maillage que dans les diagonales (wiggles dissipés, moins de dispersion)...
- ... à l'inverse, on note que les schémas Taylor-Galerkin ont une plus faible erreur de dispersion dans les directions diagonales.
- TTGC est le moins dissipatif de tous les schémas. TTG4A est le moins dispersif.
- La figure 5.19 montre une fois de plus que TTG4A est en avance de phase pour les faibles longueurs d'onde à un CFL de 0.7 ($c_R^* > c$).

5.3.2 Stabilité

Le CFL est désormais une grandeur vectorielle [100] qu'on écrit :

$$\vec{\nu} = \nu(\cos \alpha, \sin \alpha)^T$$

et ν est le module de $\vec{\nu}$. De la même manière que dans les cas monodimensionnels, on utilise le code de calcul donnant $|G(k, \alpha)|$ et $c^*(k, \alpha)/c$, afin de déterminer numériquement les limites de stabilité des schémas numériques utilisées dans AVBP. Les résultats obtenus sont indiqués dans le tableau 5.4. Sur la troisième colonne, on indique dans quelle direction de propagation le schéma devient instable. En effet, dans certains cas, un schéma peut rester stable si le train d'onde considéré est advecté dans les directions du maillage, malgré un CFL plus grand que la limite indiquée dans le tableau 5.4. Cependant, dans un calcul, il est rare, voire impossible, de n'avoir des phénomènes propagatifs que dans une seule direction.

Le tableau 5.4 met en évidence l'intérêt d'écrire les schémas Taylor-Galerkin en deux étapes. En effet, les domaines de stabilité des schémas TTG3, TTG4A et TTGC sont très peu modifiés par rapport au cas

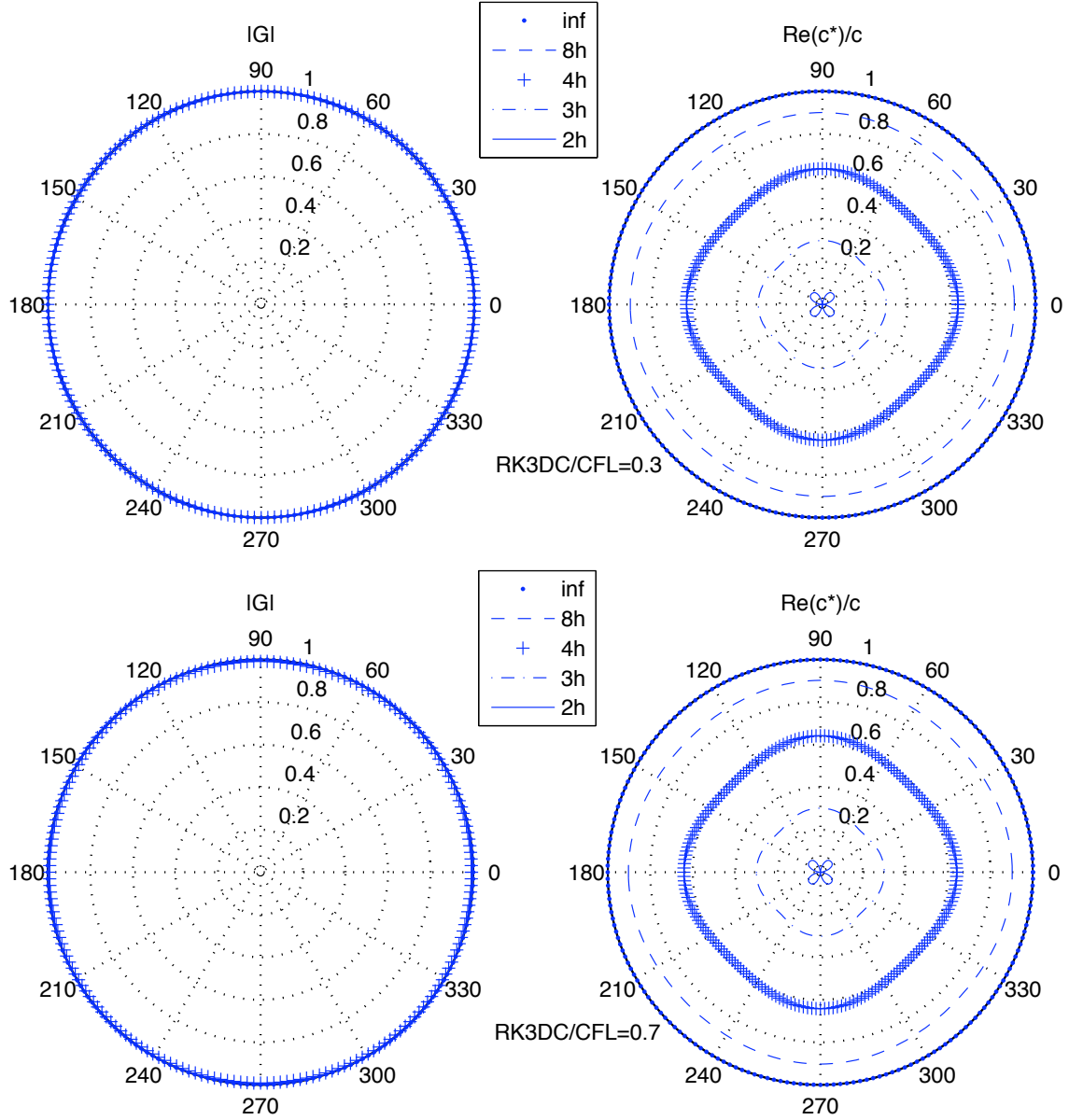


FIG. 5.16 - Module du coefficient d'amplification (à gauche) et vitesse de phase adimensionnée (à droite) pour différentes longueurs d'onde et en fonction de α . Le schéma numérique est le schéma RK3-CV cell-vertex. En haut, le CFL est de 0.3 et en bas, il est égal à 0.7.

1D. En revanche, le schéma ETG voit son domaine de stabilité sensiblement réduit (en 3D, on obtiendrait $\nu_c = 1/3$, [63]). On note ici que d'autres critères sont disponibles dans la littérature, pour des éléments linéaires. Les schémas TTG3 et TTG4A ont, sur ces éléments, une propriété remarquable : le critère de stabilité est le même, quelle que soit la dimension : $\nu_c = \sqrt{3/4}$ pour le premier et $\nu_c = 1$ pour le second. Par ailleurs, les schémas *cell-vertex* semblent aussi, au vu des tests réalisés, avoir cette même propriété.

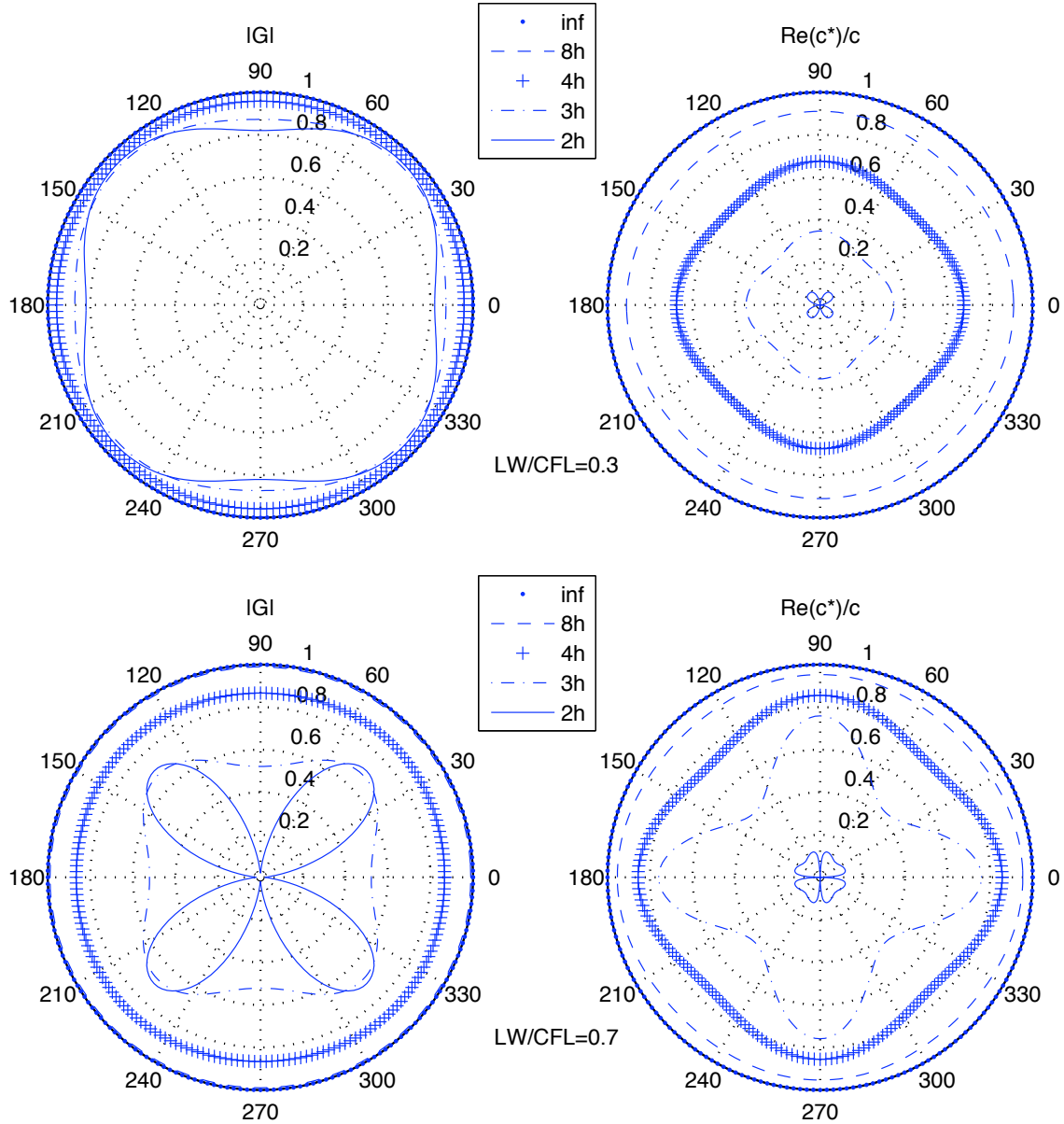


FIG. 5.17 - Module du coefficient d'amplification (à gauche) et vitesse de phase adimensionnée (à droite) pour différentes longueurs d'onde et en fonction de α . Le schéma numérique est le schéma LW cell-vertex. En haut, le CFL est de 0.3 et en bas, il est égal à 0.7.

5.4 Comparaisons des schémas d'AVBP- expériences numériques

Les "expériences numériques" présentées ici permettent de confirmer, *a posteriori*, les conclusions apportées par les analyses théoriques des schémas numériques faites dans ce chapitre. Ainsi, on peut mesurer la précision des schémas et mettre en évidence certains effets néfastes de la diffusion ou de la dispersion numérique. Il existe un grand nombre de cas tests dans la littérature. Ceux qui sont présentés ici ont été choisis, car ils représentent une partie des phénomènes présents dans une chambre de combustion.

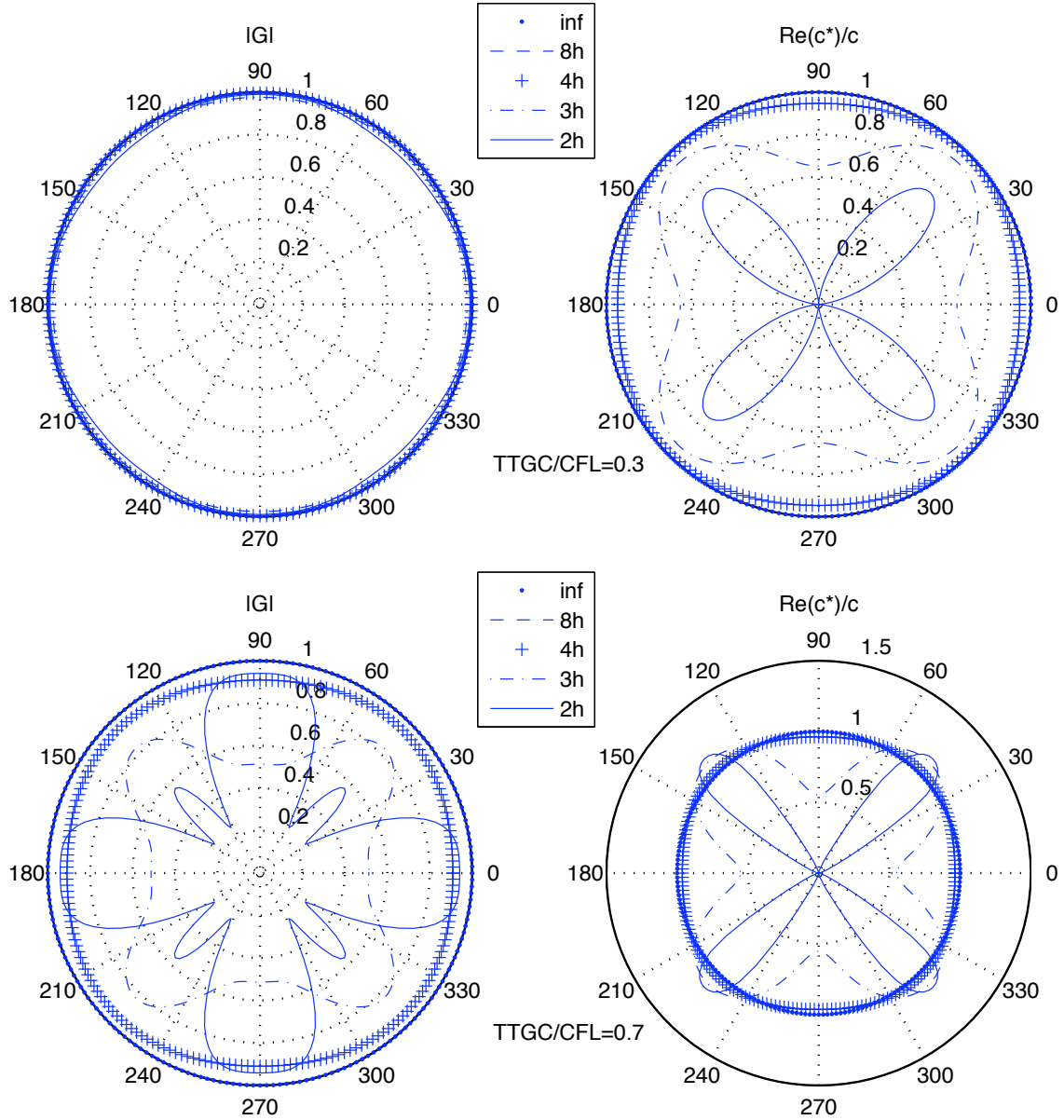


FIG. 5.18 - Module du coefficient d'amplification (à gauche) et vitesse de phase adimensionnée (à droite) pour différentes longueurs d'onde et en fonction de α . Le schéma numérique est le schéma TTGC cell-vertex. En haut, le CFL est de 0.3 et en bas, il est égal à 0.7.

5.4.1 Convection

Le cas le plus simple à étudier est évidemment la convection linéaire et permet d'observer l'évolution d'un scalaire (fraction massique ou fraction volumique, par exemple) en présence d'un champ de vitesse. Pour simplifier l'étude au maximum, on impose un champ de vitesse $\vec{c}$ uniforme dans tout le domaine de calcul et constant en temps, qui transporte un champ de scalaire passif défini à l'instant initial par $u(x, 0) = u_0(x)$. On étudiera deux types de conditions initiales. La première, très régulière, permet de calculer la précision des méthodes étudiées. La seconde, discontinue, va démontrer la limitation des schémas centrés. La figure 5.20 présente les deux types de maillages utilisés dans la suite. Le domaine

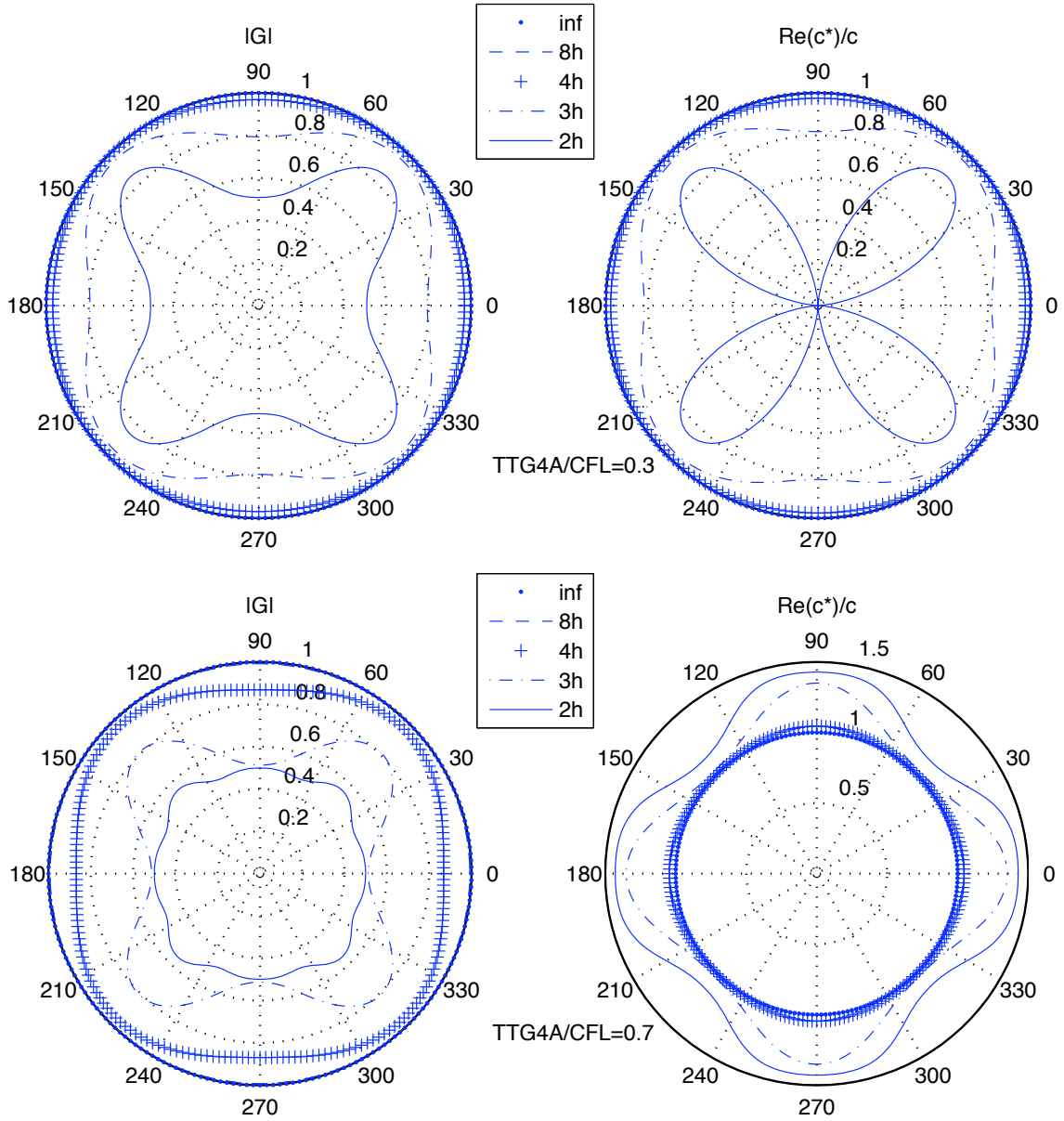


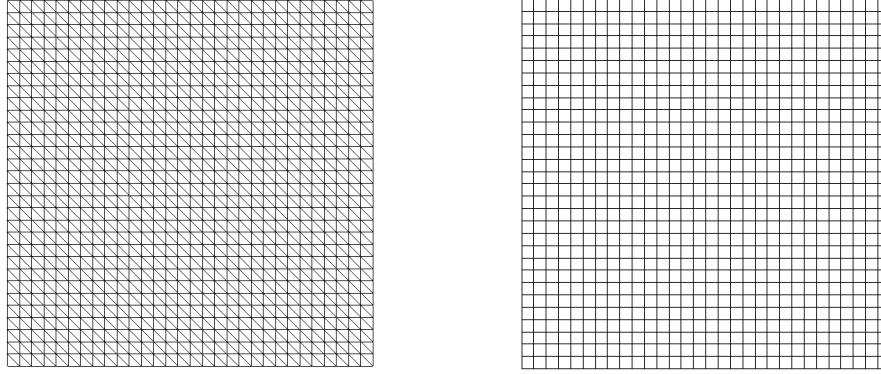
FIG. 5.19 - Module du coefficient d'amplification (à gauche) et vitesse de phase adimensionnée (à droite) pour différentes longueurs d'onde et en fonction de α . Le schéma numérique est le schéma TTG4A cell-vertex. En haut, le CFL est de 0.3 et en bas, il est égal à 0.7.

de calcul est défini de la manière suivante :

$$\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$$

Schéma	ν_c	Direction
<i>RK3-CV</i>	$\sqrt{3}$	<i>Ox</i> et <i>Oy</i>
<i>LW</i>	1	<i>Ox</i> et <i>Oy</i>
<i>ETG</i>	0,500	diagonales
<i>TTG3</i>	0,853	diagonales
<i>TTG4A</i>	0,900	diagonales
<i>TTGC(0.01)</i>	0,813	diagonales

TAB. 5.4 - Domaine de stabilité des schémas étudiés sur un maillage composé de carrés.


 FIG. 5.20 - Maillages utilisés pour les cas académiques présentés dans ce chapitre. A gauche, un maillage avec des triangles réguliers 31×31 , à droite un maillage de carrés 31×31 .

Cas n°1 : Gaussienne

Le premier champ de scalaire à transporter est une impulsion de forme gaussienne donc une fonction régulière et C^∞ . Celle-ci est définie par :

$$\begin{cases} \vec{x} \in [0, 1] \times [0, 1] \\ \vec{c} = (1, 0)^T \text{ ou } \vec{c} = (1, 1)^T \\ u_0(x) = \exp\left(\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma^2}\right) \end{cases}$$

avec $\sigma = 0.05$ m, $(x_0, y_0)^T = (0.5, 0.5)^T$ et donc d'après (5.1), on doit avoir : $0 \leq u(x, t) \leq 1 \quad \forall(\vec{x}, t)$. La figure 5.21 est une illustration de la condition initiale et la figure 5.22 montre le résultat obtenu avec le schéma LW après un tour (on a choisi ce schéma plutôt qu'un schéma TTG car la différence avec la solution initiale est parfois imperceptible à l'oeil avec ces schémas d'ordre 3). Pour réaliser l'étude de convergence, on utilise la solution obtenue à $t = 1$ s (soit 1 tour), tous les schémas ayant été utilisés avec un CFL de 0.1 environ.

L'erreur $\epsilon = u - u_h$ est proportionnelle à l'erreur de troncature $ET_{h,\Delta t}$ [75, 8], définie par la formule (5.8). Pour mesurer numériquement la précision d'un schéma, on procède donc de la façon suivante : si le schéma est précis à l'ordre s , alors $\epsilon = \mathcal{O}(h^s)$ et de même que sa norme L^2 (définition (5.9)) et :

$$\log \epsilon = \log K - s \log h.$$

Ainsi pour calculer la précision spatiale du schéma, il suffit d'effectuer plusieurs simulations identiques en changeant la taille caractéristique des mailles, puis tracer le logarithme de l'erreur. La pente fournit

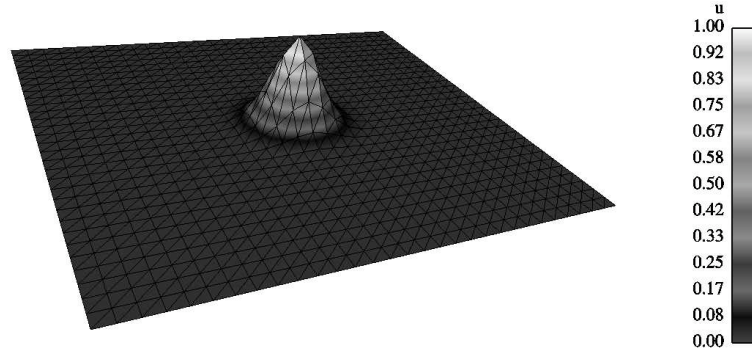


FIG. 5.21 - Champ $u_0(x)$ pour la convection de l'impulsion gaussienne sur un maillage avec des triangles réguliers 31×31 .

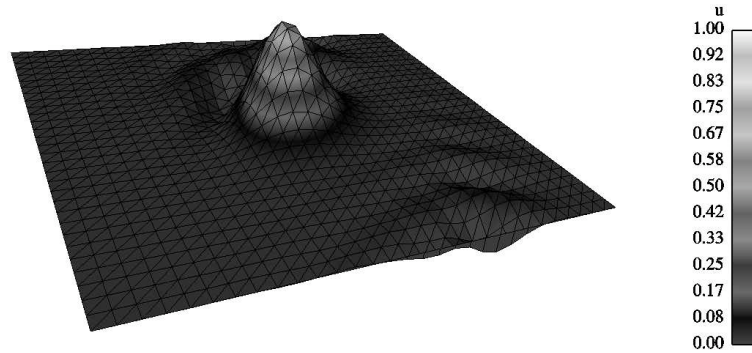


FIG. 5.22 - Champ $u(x, 1)$ obtenu avec le schéma LW pour la convection de l'impulsion gaussienne sur des triangles réguliers 31×31 . Attention ici, le maximum correspond à $\max_j(U_j) \approx 0.56$. On a choisi de ne pas mettre la même échelle que pour la figure 5.21 pour bien mettre en évidence les effets dispersifs.

l'ordre du schéma. La figure 5.23 fournit les résultats obtenus en réalisant le cas test sur différents maillages et confirme les ordres de convergence théoriques. Cette figure met aussi en évidence la différence, non négligeable, qui existe entre les schémas d'ordre 3 et les autres. En effet, en plus d'avoir une pente plus forte, l'erreur est, dans l'absolu, beaucoup plus faible, même sur maillage grossier : par exemple, la norme de l'erreur faite par TTGC sur le maillage 31×31 est à peu près égale à celle obtenue avec LW sur maillage 131×131 !

La figure 5.24 montre une coupe dans la direction Ox à $y = 0, 5$. On note trois comportements pour les trois types de schémas testés (GRK et LW-EF n'apparaissent pas pour ne pas charger la figure, sachant qu'ils fournissent des résultats sensiblement identiques à ceux de TTG4A et TTGC).

- Les schémas d'ordre 1, dans le cas présent, donnent les mêmes résultats. L'onde gaussienne est très diffusée (le maximum est à seulement un tiers de sa valeur originelle), sa forme gaussienne très étalée. En revanche, il n'y a pas de dispersion : la gaussienne est "propre" (pas d'oscillations numériques) car les hautes fréquences ont été dissipées. En conséquence, le maximum est au bon endroit ($x = 0, 5$).
- Les schémas d'ordre 2 sont beaucoup moins dissipés (le maximum est environ aux trois quarts de la valeur initiale). En revanche, les effets de dispersion se font fortement sentir (oscillations en amont de la gaussienne) et, de ce fait, le maximum ne se trouve pas à $x = 0, 5$ après un tour. D'autre part, les oscillations numériques indiquent que le principe du maximum n'est pas respecté : l'amplitude de l'onde convectée n'est plus comprise entre 0 et 1 (les bornes initiales).

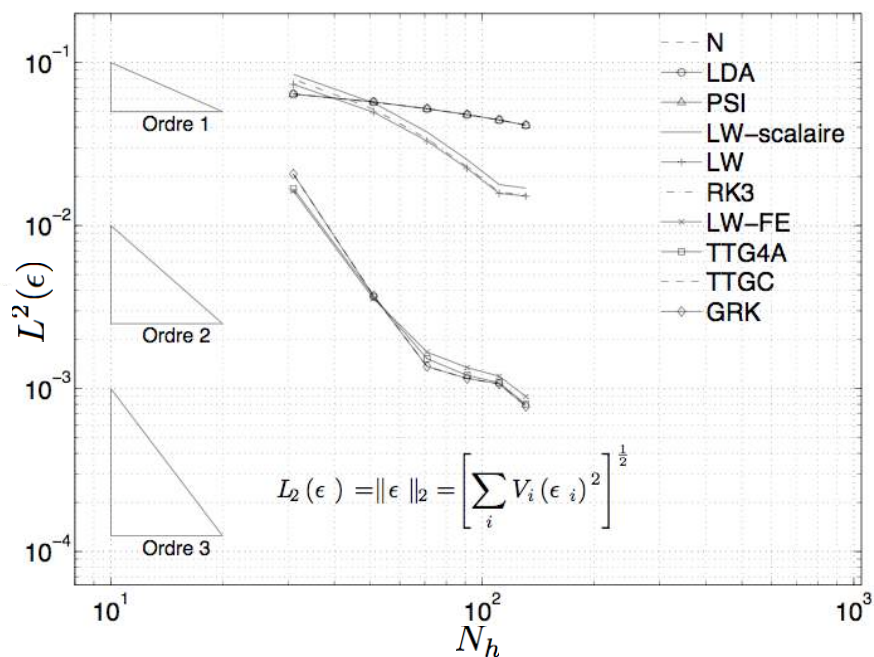


FIG. 5.23 - Convergence en maillage pour le cas de la gaussienne avec différents schémas numériques pour le cas $\vec{c} = (1, 0)^T$.

- Sur ces cas tests, les schémas d'ordre 3 donnent une solution quasi-parfaite. En regardant dans le détail, on note que le maximum de TTG4A est légèrement plus faible que celui de TTGC et que le principe du maximum n'est pas non plus respecté.

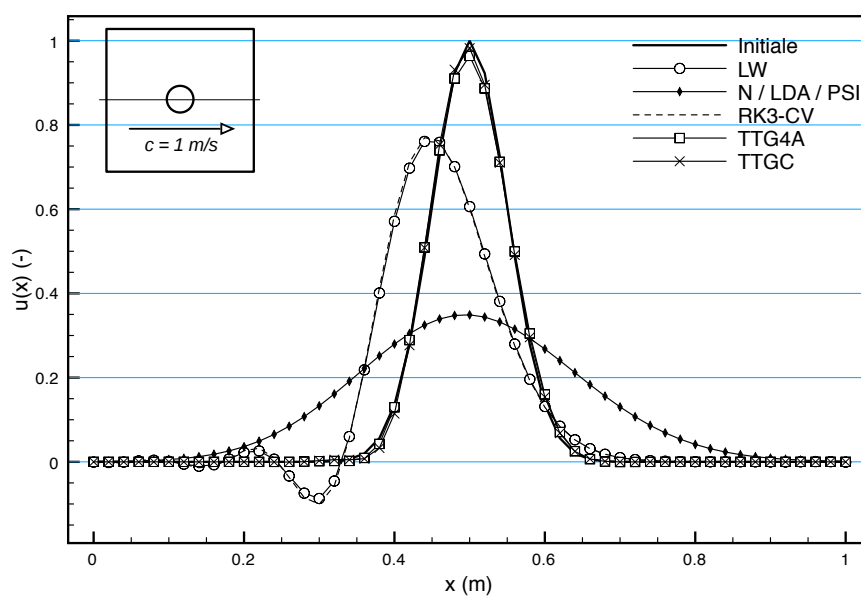


FIG. 5.24 - Profils de $u_h(x)$ pour $y = 0,5$ après un tour complet.

Lorsque le vecteur vitesse $\vec{c}$ change, l'erreur n'est plus exactement la même, bien que pour tous les schémas, l'ordre de convergence n'est pas modifié (voir figure 5.25). Ceci est dû, comme on l'a montré section 5.3, à l'anisotropie des schémas numériques qui possèdent des directions de propagation privilégiées. L'ordre de grandeur de l'erreur, ainsi que sa vitesse de convergence restent toutefois les mêmes.

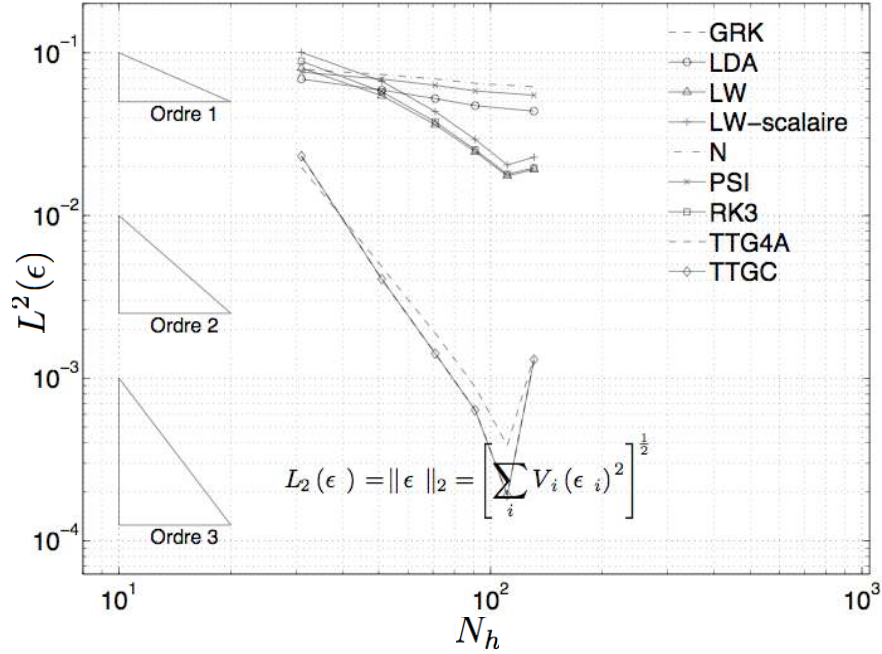


FIG. 5.25 - Convergence en maillage pour le cas de la gaussienne avec différents schémas numériques pour le cas $\vec{c} = (1, 1)^T$.

Enfin la figure 5.26 indique l'erreur réalisée par les schémas numériques sur des maillages composés de carrés¹¹. Celle-ci est globalement la même que pour des triangles. Toutefois, il faut noter que le pas de temps n'est pas le même pour les deux types de maillages. Ainsi, le pas de temps pour les triangles est environ $\sqrt{2}$ fois plus petit. Dans ce type de cas, on voit donc l'intérêt d'un maillage de quadrangles.

¹¹Pour le moment, les schémas upwind multidimensionnels ne sont définis que sur des simplexes. La généralisation à des quadrangles en 2D existe [5] mais n'est pas étudiée ici.

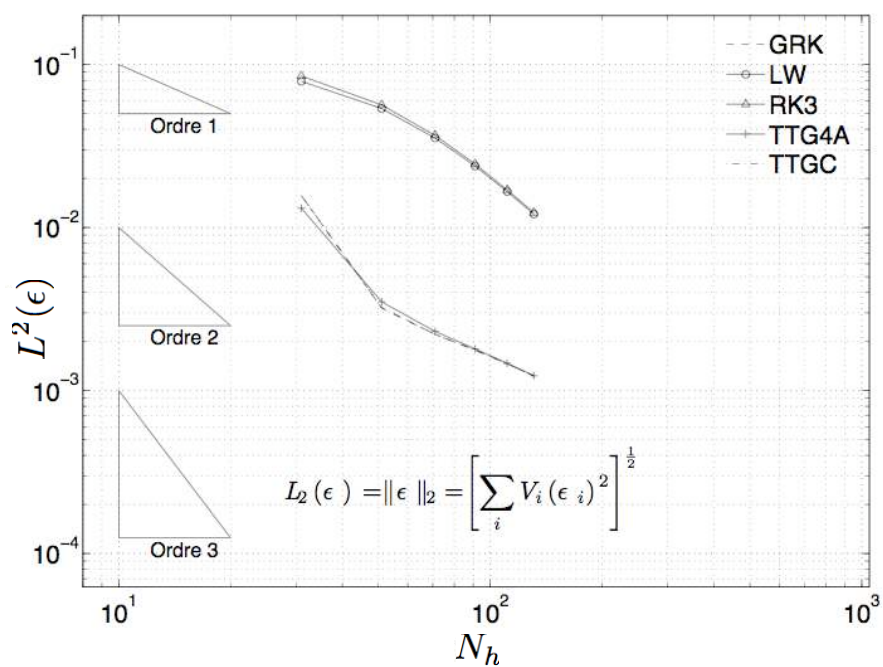


FIG. 5.26 - Convergence en maillage pour le cas de la gaussienne avec différents schémas numériques pour le cas $\vec{c} = (1, 0)^T$. Ici les maillages sont composés de carrés.

Cas n°2 : Cylindre

On répète les tests précédents en changeant la condition initiale. Celle-ci est désormais définie de la manière suivante :

$$\begin{cases} \vec{x} \in [0, 1] \times [0, 1] \\ \vec{c} = (1, 0)^T \\ u_0(x) = 1 \text{ si } \|\vec{x} - \vec{x}_0\| \leq r, \quad 0 \text{ sinon.} \end{cases}$$

et $r = 0.05m$. La fonction est continue par morceaux et n'est plus dérivable en tout point. Le tracé de l'erreur, figure 5.27, indique que les schémas convergent vers la solution. Cependant, l'ordre de convergence est inférieur à 1 et l'erreur commise est bien supérieure à ce qui est montré figure 5.23. Les schémas peu dissipatifs sont ceux dont la qualité est la plus dégradée par rapport au cas précédent. En effet, toutes les méthodes de résolution souffrent du phénomène de Gibbs (oscillations numériques près des discontinuités), dû à la discrétisation spatiale. Les oscillations produites ont une longueur d'onde faible. Or les schémas d'ordre supérieur à 2 ne les dissipent pas ou peu. En outre, ils convectent certaines des oscillations non-physiques à des vitesses de groupe erronées, du fait de leur erreur de dispersion. De ce fait, l'erreur globale devient importante, comme on peut le voir sur la figure 5.28. On note finalement que le schéma TTG4A a le meilleur comportement parmi les schémas d'ordre élevé.

A l'inverse, les schémas upwind sont peu sensibles à ce phénomène. Ainsi, ils commettent des erreurs qui ne sont que légèrement plus élevées que pour la convection d'une gaussienne. Globalement, l'ordre de convergence et la valeur de l'erreur sont très peu détériorés par rapport au cas précédent. En outre, comme dans le cas de la gaussienne, ils respectent le principe du maximum.

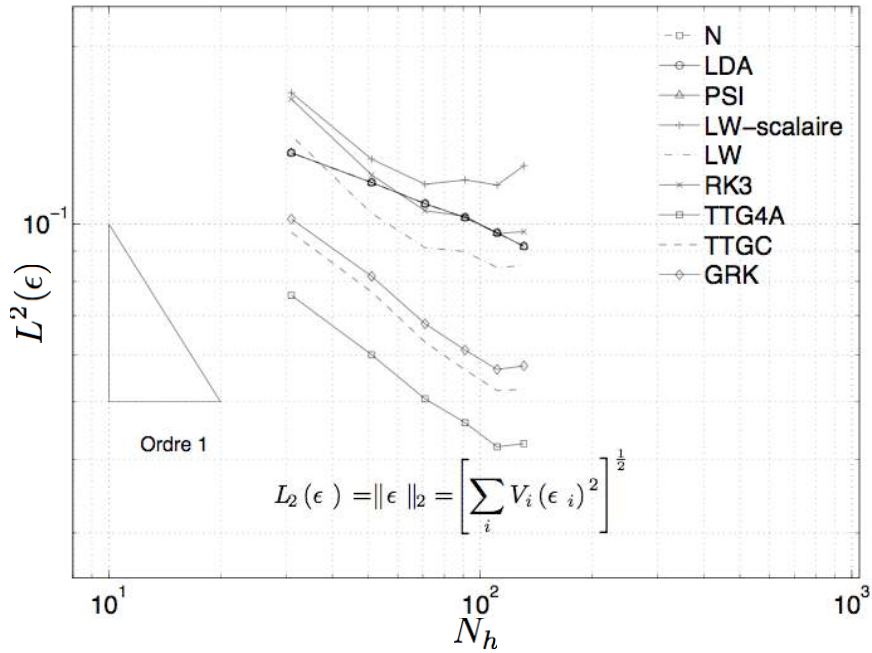
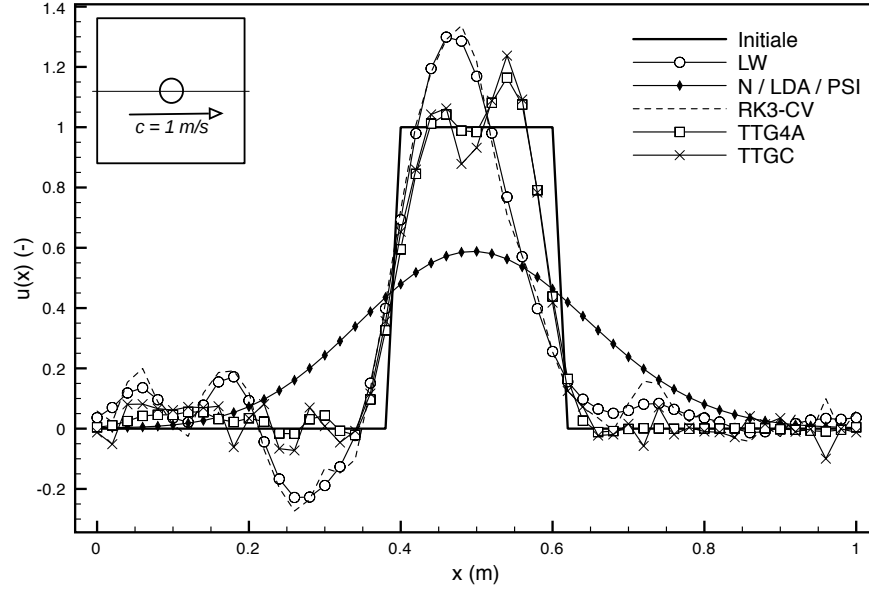


FIG. 5.27 - Convergence en maillage pour le cas du créneau avec différents schémas numériques.


 FIG. 5.28 - Profils de $u_h(x)$ pour $y = 0,5$ après un tour complet (condition initiale : onde en créneau).

5.4.2 Vortex

Dans un calcul réel (avec diffusion et modèles de turbulence), un tourbillon peut subir des contraintes qui vont changer sa forme, sa taille... Ces contraintes peuvent être d'origine physique et, malheureusement aussi, d'origine numérique. Ce cas simple d'un vortex bidimensionnel convecté représente, de manière simplifiée la façon dont la résolution des schémas va modifier une structure turbulente à cause des erreurs de dissipation et de dispersion relatives au schéma de convection. Le domaine de calcul est le même que pour les cas de convection précédents (carré de 1m de côté). L'écoulement est isentropique et le vortex est défini par les champs de vitesse et de pression suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{x} \in [0, 1] \times [0, 1] \\ u = \bar{u} - \frac{\Gamma}{R^2} y e^{-\frac{x^2+y^2}{2R^2}} \quad v = \frac{\Gamma}{R^2} x e^{-\frac{x^2+y^2}{2R^2}} \quad p - \bar{p} = -\frac{\bar{\rho}\Gamma^2}{R^2} e^{-\frac{x^2+y^2}{2R^2}} \end{array} \right.$$

Le calcul est réalisé avec un CFL acoustique de 0.7 et le fluide considéré est de l'air à pression et température ambiantes (1 atm et 300K). Ici, l'erreur est calculée sur la masse volumique locale ρ_j (qui ne reste pas constante) après avoir adimensionné celle-ci par la masse volumique initiale $\bar{\rho}$. On note que TTGC produit les meilleurs résultats. L'ordre de convergence est particulièrement bon (nettement supérieur à 3, quand TTG4A est légèrement inférieur à 3), comme l'indique la figure 5.29. La pression obtenue après un tour concorde avec la solution initiale (figure 5.30), ce qui n'est pas tout à fait le cas avec TTG4A qui est légèrement dissipé au niveau du maximum (celui-ci se trouve au bon endroit en revanche). Comme on s'y attendait, le schéma LW montre des performances bien en deçà des schémas Taylor-Galerkin. L'ordre de convergence est plutôt aux alentours de 1, le tourbillon n'a pas été convecté à la bonne vitesse. En outre, la dépression en son centre est plus faible.

Les schémas Taylor-Galerkin montrent, avec ce test simple, leur capacité à simuler la turbulence et en particulier TTGC, qui, ne dissipant quasiment pas, n'interagira que très peu avec la physique de l'écoulement.

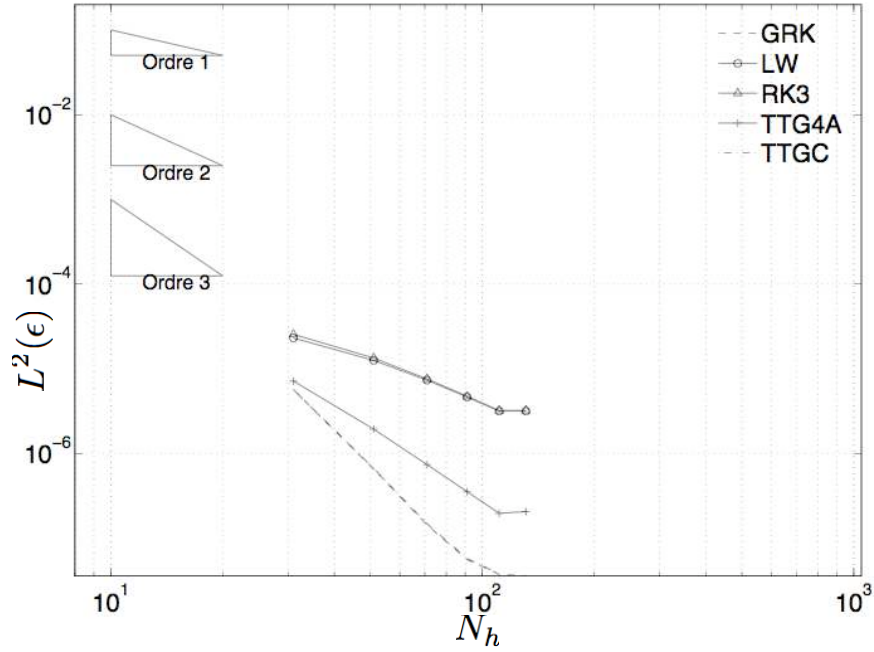


FIG. 5.29 - Convergence en maillage pour le cas du tourbillon avec différents schémas numériques.

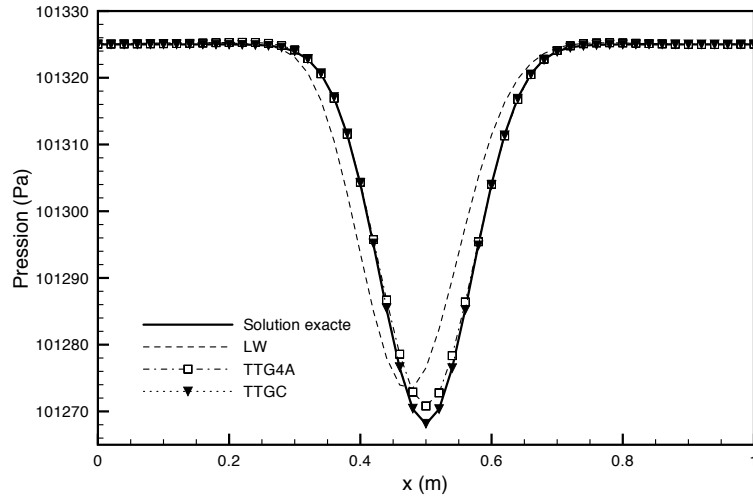


FIG. 5.30 - Profils de pression en $y = 0.5$.

Attention : Sur certaines figures de convergence, on peut noter un comportement chaotique pour le maillage le plus fin - l'erreur est parfois plus importante que pour des grilles plus grossières (comme sur la figure 5.25, par exemple), ce qui n'est pas attendu. Ce problème a une explication. Le calcul de l'erreur est théoriquement réalisé à $t = 1$ s. Or les simulations sont faites à CFL constant et non à pas de temps constant. Par conséquent, le temps final des simulations est en réalité $t = 1 + \varepsilon$ s, avec ε très faible mais non nul. Ainsi le calcul de l'erreur est légèrement faussé et cet effet devient sensible pour les

maillages les plus fins.

5.4.3 Onde acoustique linéaire

Une des caractéristiques d'AVBP, par rapport à bon nombre de codes de calcul permettant de réaliser des LES réactives, est de résoudre les écoulements de fluides **compressibles**. Une résolution fidèle du champ acoustique est nécessaire pour observer la génération et l'évolution des instabilités de combustion. On étudie donc ici le comportement d'une onde acoustique plane monochromatique et progressive définie telle que $p' = \bar{\rho}cu'$, où les grandeurs moyennes sont notées $\bar{\phi}$ et les champs acoustiques avec ϕ' . Les grandeurs acoustiques ont une amplitude très faible devant les grandeurs moyennes (pour rester dans le domaine linéaire). On a :

$$p'(x, 0) = 100 \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) = \bar{\rho}cu' \quad \text{et} \quad L = 1 \text{ m},$$

et toutes les autres grandeurs sont choisies pour reproduire de l'air au repos et à température et pression ambiantes (300K et 1 atm). Les champs initiaux imposés sur la vitesse et la pression sont indiqués figure 5.31.

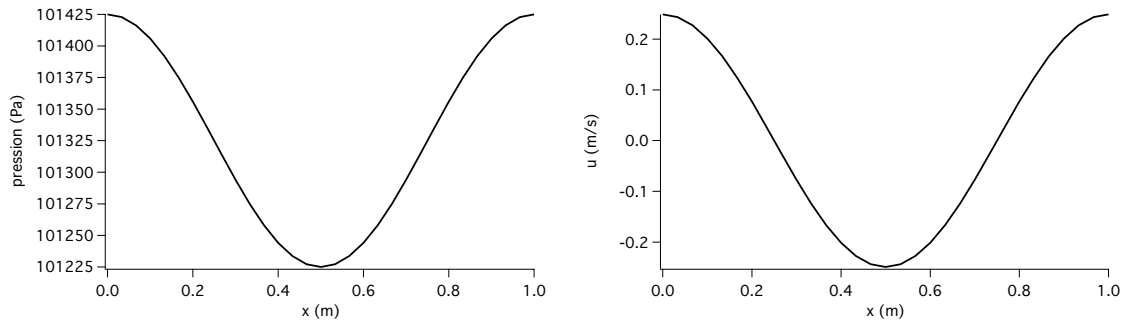


FIG. 5.31 - Conditions initiales sur la pression et la vitesse pour simuler la propagation d'une onde acoustique monochromatique.

Le domaine Ω est monodimensionnel et périodique. On a choisi $N_h = 31$, ce qui fait une longueur d'onde $\lambda = 30h$. Le CFL acoustique est fixé à 0.7.

La théorie indique que l'amplitude de l'onde ne doit pas changer au cours du temps. On présente, figure 5.32, la variation temporelle de la pression sur le point situé au milieu du domaine, afin d'étudier les effets dissipatifs des schémas numériques sur l'acoustique pour les schémas LW et TTGC.

Après $N_t = 4328$ itérations, ce qui correspond à environ 100 périodes, on compare la grandeur de $\frac{\|p'_{calcul}\|_\infty}{\|p'_{theo}\|_\infty}$ avec $|G|^{N_t}$ pour $kh = \frac{\pi}{15}$. Le tableau 5.5 indique les valeurs obtenues et comme attendu, il y a quasiment égalité entre théorique et calcul, ce qui confirme la validité de la méthode de Von Neumann dans le cas présent. L'onde acoustique peut être en effet vue comme un scalaire transporté à la vitesse c . Ainsi, toutes les conclusions déjà faites dans le cadre de la convection linéaire concernant la dissipation et la dispersion sont applicables ici.

En règle générale, les oscillations acoustiques qui présentent un danger potentiel, en termes d'instabilités de combustion, sont plutôt basses fréquences (inférieures à 1000 Hz - il s'agit souvent du premier

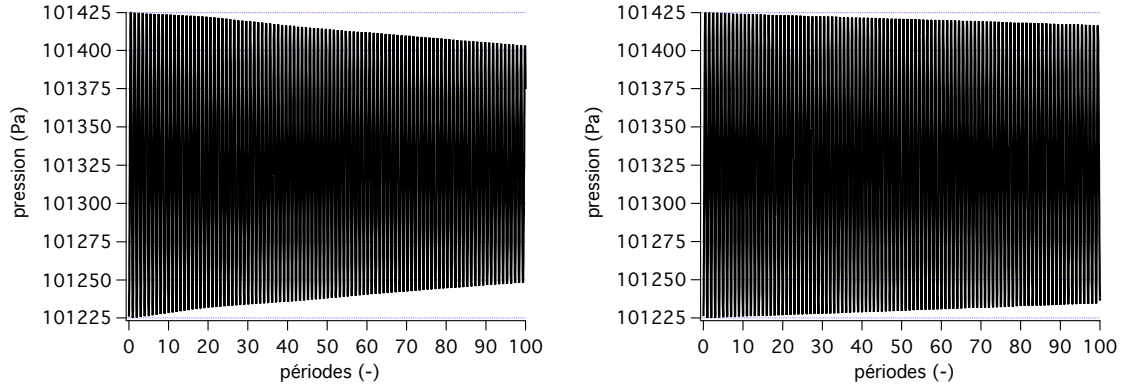


FIG. 5.32 - Evolution temporelle de la pression au milieu du domaine de calcul. A gauche : LW. A droite : TTGC. Les courbes en trait pointillé correspondent à la valeur théorique de référence.

Schéma	AVBP	$ G ^{N_t}$
LW	78% ($-22Pa$)	$\approx 77\%$ ($G \simeq 0.99994$)
TTGC	91% ($-9Pa$)	$\approx 92\%$ ($G \simeq 0.99998$)

TAB. 5.5 - Comparaisons entre résultats de calculs avec AVBP et la valeur théorique fournie par l'analyse de Von Neumann.

mode longitudinal, en général un quart d'onde ou un demi-onde). Les longueurs d'onde associées sont de l'ordre du mètre, sachant que la taille de maille dans un calcul est inférieure au centimètre (voire au millimètre), soit (bien) plus de 100 points dans un quart ou la moitié d'une longueur d'onde ! A cette échelle, le coefficient d'amplification est quasiment égal à 1 pour tous les schémas, donc ces pulsations acoustiques sont très bien résolues.

5.4.4 Viscosité artificielle

Stabilité des opérateurs

On étudie ici les termes de viscosité artificielle, toujours sur un maillage **monodimensionnel** et **régulier**. Comme les deux opérateurs approximent des laplaciens, alors on peut les exprimer de la manière suivante :

$$\mathbf{D}_j^{(2)} = -\frac{\nu_j^{AV}}{V_j} \int_{C_j} \Delta \mathbf{U} dV \quad (5.56)$$

$$\mathbf{D}_j^{(4)} = \frac{\kappa_j^{AV}}{V_j} \int_{C_j} \Delta \Delta \mathbf{U} dV \quad (5.57)$$

Ceci permet de donner les expressions des viscosités et hyperviscosités artificielles :

$$\nu_j^{AV} = \frac{\epsilon_j^{(2)} \zeta_j h^2}{4\Delta t} \quad \text{et} \quad \kappa_j^{AV} = \frac{\epsilon_j^{(4*)} h^4}{16\Delta t},$$

avec $\zeta_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{\zeta_e V_e}{n_v^e}$ et $\epsilon_j^{(4*)} = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{\epsilon_e^{(4*)} V_e}{n_v^e}$. Ici le sensur ζ_e peut être un de ceux présentés

section 4.11. Sur des maillages réguliers, les opérateurs sont similaires aux opérateurs classiques. Ainsi on peut écrire :

$$A^{AV2} = \frac{\nu^{AV}}{h^2} (E - 2 + E^{-1}) \quad (5.58)$$

$$A^{AV4} = -\frac{\kappa^{AV}}{h^4} (E^2 - 4E + 6 - 4E^{-1} + E^{-2}) \quad (5.59)$$

où A^{AV2} et A^{AV4} sont respectivement les symboles de la viscosité artificielle d'ordre 2 et d'ordre 4. Associés à un avancement temporel d'Euler aval, on peut introduire des critères de stabilité (par analogie avec le critère de Fourier). L'analyse monodimensionnelle de Von Neumann prédit, que l'opérateur de viscosité d'ordre 2 est stable si : $0 \leq \epsilon^{(2)}\zeta_j \leq 2$. De même, pour la viscosité d'ordre 4, on assure la stabilité pour : $\epsilon_j^{(4*)} \leq 0.496$. D'un point strictement quantitatif, ces critères n'ont pas une grande valeur pour des applications dans des géométries complexes avec des maillages tri-dimensionnels, non structurés et très irréguliers. Néanmoins, ils rappellent que **la viscosité artificielle peut rendre un calcul instable** ! Cette assertion est particulièrement valable pour l'hyperviscosité. Il n'est pas rare qu'un utilisateur, cherchant à amortir des *wiggles*, les amplifie au contraire en ayant imposé une valeur $\epsilon^{(4)}$ trop importante.

Expériences numériques

On reprend le cas test de convection en ajoutant ici les opérateurs de viscosité artificielle. On présente les résultats obtenus avec AVBP sur un cas de convection linéaire d'un saut de scalaire en forme de créneau (ici le scalaire est la densité de particules) réalisé avec le schéma TTGC avec un CFL très faible ($\nu_{acous} = 0.7$ et $\tilde{u}_p = 1m/s$). Le résultat de référence est celui obtenu sans ajouter de viscosité artificielle ("No A.V" sur la figure 5.33). Quatre tests sont effectués : on ajoute dans le premier de la viscosité d'ordre 2, dans le second de la viscosité d'ordre 4 et pour les deux derniers tests une combinaison des deux.

Sans viscosité, il est clair que le résultat est très peu satisfaisant (figure 5.33). Malgré les nombreuses qualités du schéma qu'on a énumérées tout au long de ce chapitre, la présence des hautes fréquences, dans le spectre de la condition initiale, se traduit par de nombreuses oscillations dans la solution, du fait de l'erreur de phase du schéma (pourtant globalement faible). Le principe du maximum n'est pas respecté par TTGC (ni pour les maxima, ni pour les minima) comme l'indiquent les figures 5.34 et 5.35.

Il convient de préciser que ce type de conditions initiales en créneau est à éviter, autant que possible. Si en revanche, on désire absolument les employer ou si l'écoulement lui-même créé cette forme de signal (ce qui peut se produire dans le cas de la phase dispersée), alors l'ajout de viscosité artificielle permet de lisser le créneau (gradients plus doux). Après un tour, la créneau a la forme d'une gaussienne et le maximum a diminué de manière sensible (figure 5.33). On note que la viscosité artificielle d'ordre 2 seule donne ici un meilleur résultat que les autres combinaisons possibles. La viscosité d'ordre 4 a, en effet, tendance à augmenter l'amplitude des oscillations, de part et d'autre de la gaussienne, comme on le voit sur la figure 5.33. Cela confirme, *a posteriori*, le risque que peut engendrer l'utilisation d'hyperviscosité artificielle. La différence entre les deux tests, dans lesquels sont activés les 2 opérateurs

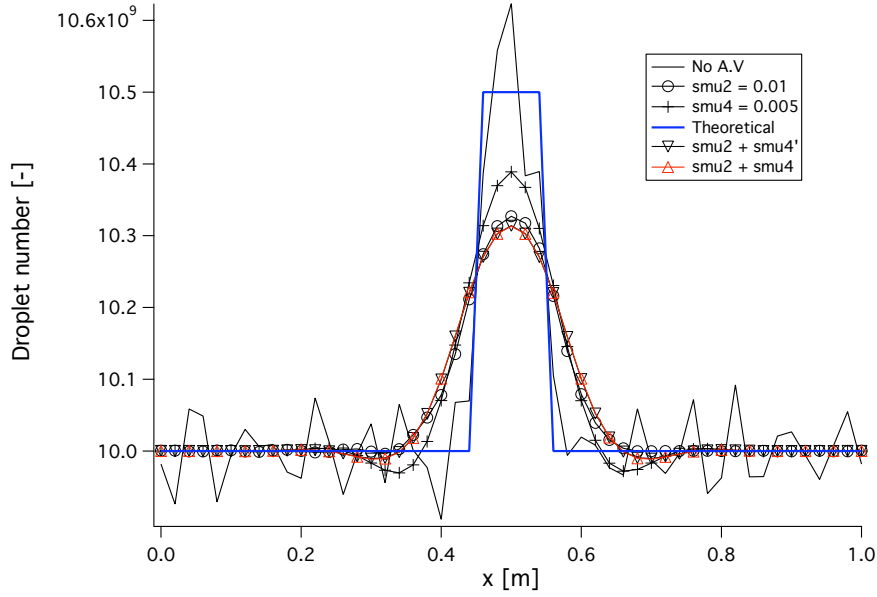


FIG. 5.33 - Convection d'une distribution scalaire en créneau. Le résultat est obtenu après 1 tour avec le schéma TTGC.

de viscosité, vient de la définition $\epsilon^{(4*)}$. Dans le premier cas, la définition (4.124) est utilisée comme le préconisent Jameson et al. [107]. Dans le second, on utilise directement $\epsilon^{(4*)} = \epsilon^{(4)}$.

Les figures 5.34 et 5.35 mettent en évidence un phénomène qui peut s'avérer préoccupant quand on considère des scalaires passifs ou la phase dispersée : le principe du maximum n'est pas respecté, lors des convections de signaux de forme créneau avec viscosité artificielle, dans cette expérience, bien que cette violation ne soit pas très sensible. Il est sans doute possible d'assurer que la solution reste théoriquement bornée entre les limites fixées par la solution initiale (et la physique !), mais au détriment de l'erreur de dissipation qui est déjà assez grande ici. Par ailleurs, bien que dans le cas présent les différences soient faibles, les cas tests en changeant la définition de $\epsilon^{(4*)}$ confirment les recommandations de Jameson et al. [107]. La viscosité artificielle d'ordre 4 doit être réduite, voire désactivée, lorsque la viscosité d'ordre 2 agit.

5.5 Conclusions et discussions

5.5.1 Sur les schémas d'AVBP

Les analyses réalisées dans ce chapitre ont permis d'accroître la connaissance des schémas utilisés dans AVBP, et, en particulier, les schémas Taylor-Galerkin. Les relations de dispersion des schémas Taylor-Galerkin, ainsi que l'étude des nombres d'onde modifiés et des vitesses de groupe sont une démonstration de leurs excellentes performances en terme de dispersion, très comparable à un schéma de Padé d'ordre 6, réputé pour avoir de grandes qualités en terme de résolution spectrale. Les schémas classiques et totalement explicites en espace sont nettement distancés, même lorsqu'ils sont d'ordre plus élevé. Tous ces résultats font des schémas TTG de très bons candidats pour la LES.

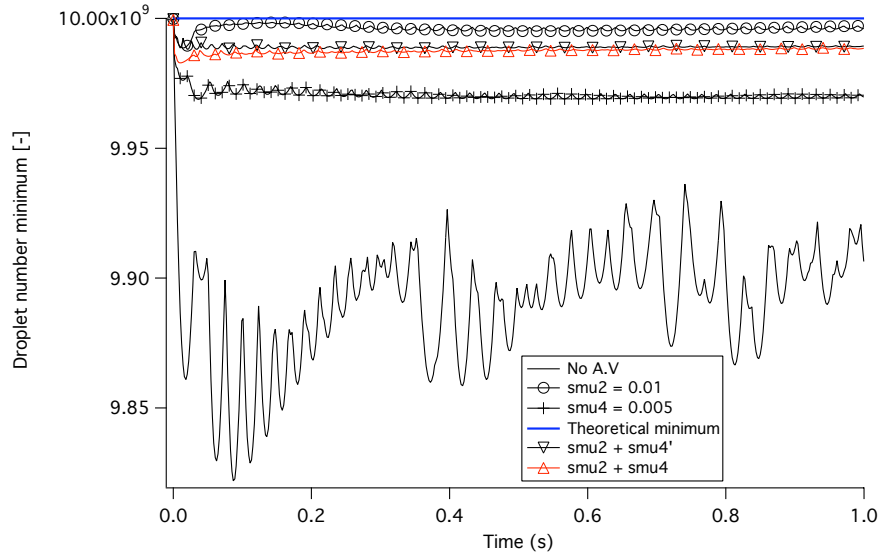


FIG. 5.34 - Evolution temporelle des minima du scalaire convecté dans les différents cas.

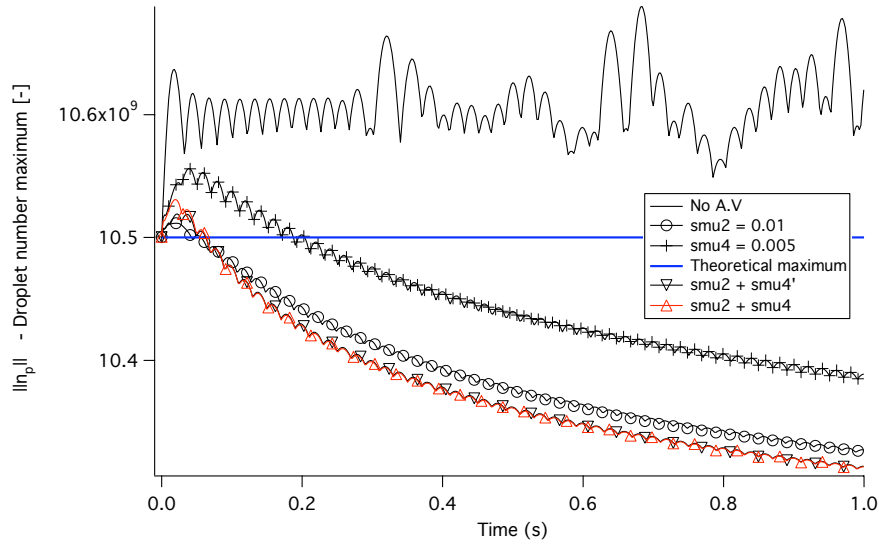


FIG. 5.35 - Evolution temporelle des maxima du scalaire convecté dans les différents cas.

En ce qui concerne les erreurs de diffusion, les conclusions sont plus contrastées. Les schémas Taylor-Galerkin (excepté TTGC) sont dissipatifs aux hautes fréquences, ce qu'on cherche à éviter lorsqu'on réalise des LES (le modèle de sous-maille est censé assurer ce rôle). Sur des configurations simples, cela peut s'avérer problématique [47]. Le schéma TTGC, de par sa très faible diffusion, répond à ce problème. Le cas test du tourbillon est, à ce titre, une illustration concrète.

Il faut toutefois garder en mémoire le concept de dissipation au sens de Kreiss. Malgré le modèle de turbulence et l'opérateur de diffusion, l'absence de dissipation du schéma de convection aux hautes fréquences peut le rendre inutilisable. En présence de géométries complexes, la stabilité devient une

question encore plus centrale et les *wiggles* encore plus nombreux. L'ajout de viscosité artificielle est généralement la réponse à bon nombre de ces problèmes. La question est alors : qui de la viscosité artificielle ou de la viscosité numérique fera le travail le plus efficace ? Cette interrogation est sujette à controverses. L'auteur de ce manuscrit pense, sans pour autant avoir de preuve formelle et définitive, que c'est plutôt au schéma numérique d'assurer une certaine stabilité au calcul et d'éviter à l'utilisateur le jeu du réglage des paramètres $\epsilon^{(2)}$ et $\epsilon^{(4)}$ liés à la viscosité artificielle.

5.5.2 Sur leurs limitations concernant la résolution de la phase dispersée

Si les schémas numériques utilisés dans AVBP ont déjà fait leur preuve pour résoudre la phase porteuse [218, 217], il n'en est pas de même pour la phase dispersée, en particulier lorsque les modèles de mouvement décorrélé sont désactivés (ce qui est le cas sur toutes les simulations en configurations complexes à l'heure actuelle). Comme on l'a dit précédemment, un nuage de gouttes est composé d'entités incompressibles, mais son comportement global rappelle celui d'un fluide très compressible. Les gradients très importants (entre une zone d'accumulation de gouttes et une zone de vide, comme on peut en trouver entre deux tourbillons) peuvent être légion dans un écoulement turbulent. Comme on l'a déjà précisé, le choix d'utiliser les mêmes schémas que pour le gaz a posé de nombreux problèmes de stabilité [109, 192] dans le passé. Ainsi, l'emploi de viscosité artificielle est indispensable et dans des proportions bien plus importantes que pour le gaz, comme en témoignent le cas de convection d'un créneau et surtout le calcul en géométrie complexe qui suit. Comme on l'a montré dans ce chapitre, les schémas décentrés amont sont beaucoup plus robustes mais dissipent aussi assez fortement, bien que cette diffusion numérique ne se fasse que dans la direction de propagation (autre gros avantage par rapport à la viscosité artificielle).

5.5.3 Une voie de développement

On propose une solution qui apparaît prometteuse. On reprend le problème étudié au paragraphe 5.4.1, c'est-à-dire la convection d'une impulsion de scalaire passif de forme gaussienne ou en créneau (on ajoute une forme conique aussi). Le domaine est toujours bidimensionnel, carré de 1m de côté, périodique et la vitesse de convection est $\vec{c} = (1, 0)^T$. Les figures 5.36 à 5.38 montrent les résultats obtenus avec une formulation FCT (qu'on a évoquée section 4.7), PSI et LW, après 1 tour (le CFL est égal à 0,3). Le schéma FCT permet d'améliorer considérablement les problèmes de diffusion numérique des schémas amont, tout en assurant une grande robustesse et en restant positif. On peut l'exprimer de la manière suivante :

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \Delta t \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \delta U_{j,e}^{n,(L)} + \underbrace{\Delta t \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \alpha_e \left(\delta U_{j,e}^{n,(H)} - \delta U_{j,e}^{n,(L)} \right)}_{\text{contribution anti-diffusive}} \quad (5.60)$$

où $\delta U_{j,e}^{n,(L)}$ est la mise à jour temporelle issue d'un schéma amont positif (ici on a choisi PSI, on aurait pu prendre N) et $\delta U_{j,e}^{n,(H)}$ la mise à jour d'un schéma d'ordre élevé (ici on utilise LW). α_e a le rôle de limiteur et contrôle la contribution anti-diffusive afin d'éviter l'apparition d'un nouvel extremum dans la solution [104].

Comme on peut le constater sur les figures 5.36 à 5.38, la méthode FCT démontre un grand potentiel, combinant à la fois une dissipation assez faible et la positivité de la solution. Cela en fait un très bon candidat pour les simulations Eulériennes d'écoulements diphasiques en géométrie complexe (maillages non structurés). Il faut toutefois l'adapter à un système d'équations, ce qui n'est pas une tâche aisée.

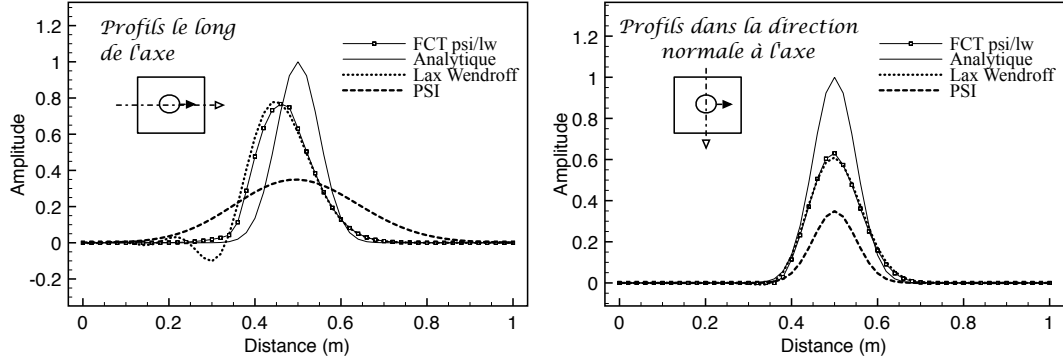


FIG. 5.36 - Profils de u_h après 1 tour complet. Le schéma FCT donne des résultats proches de LW, tout en étant positif. La solution initiale a une forme de gaussienne.

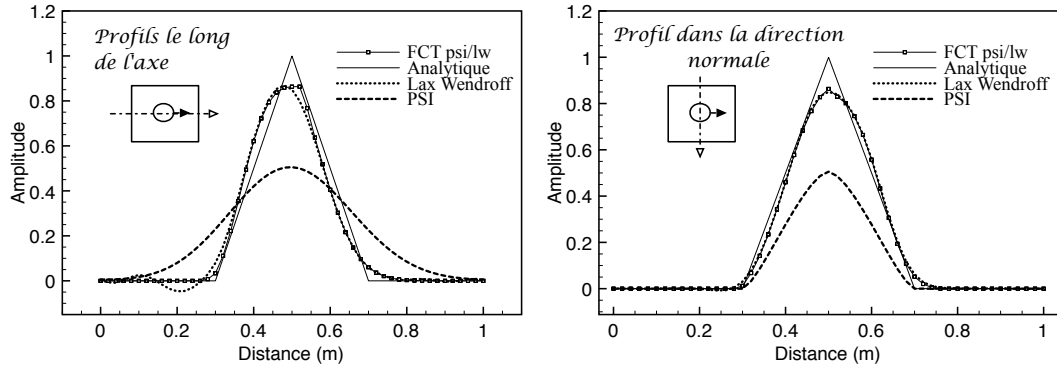


FIG. 5.37 - Profils de u_h après 1 tour complet. Le schéma FCT donne des résultats proches de LW, tout en étant positif. La solution initiale a une forme de triangle.

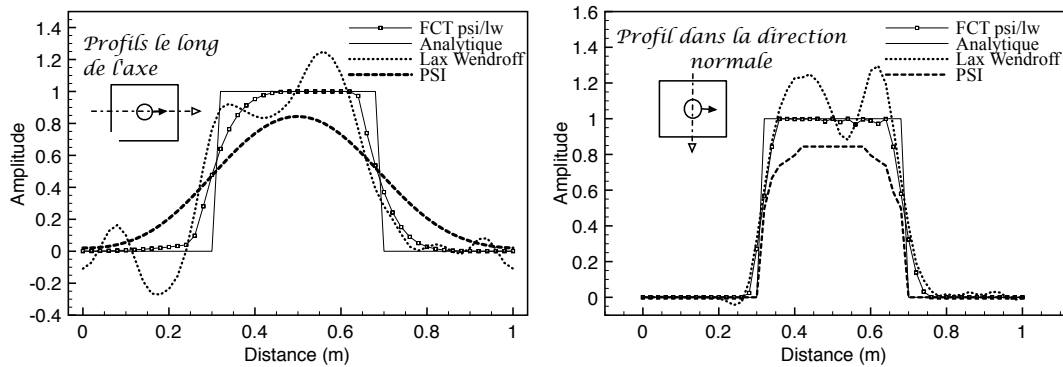


FIG. 5.38 - Profils de u_h après 1 tour complet. Le schéma FCT donne des résultats proches de LW, tout en étant positif. La solution initiale a une forme de créneau.

Chapitre 6

Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - influence des conditions limites

Introduction

Dans le chapitre précédent, on a présenté une analyse des schémas numériques d'AVBP valable dans un domaine périodique ou infini. Or, en pratique, les chambres de combustion sont des domaines bornés et fermés, et l'influence des bords est loin d'être négligeable : ils peuvent dégrader considérablement la précision des résultats, dissiper excessivement ou même faire diverger totalement une méthode censée être stable [30].

Clairement, dès qu'on ajoute les bords du domaine, l'analyse numérique se complique fortement. La méthode de Von Neumann n'est plus applicable, il faut donc trouver un autre moyen pour quantifier l'erreur engendrée par un schéma et déterminer les conditions de stabilité.

Dans ce chapitre, on reprend le problème du mode acoustique, étudié section 5.4, mais cette fois-ci avec des bords (cavité acoustique monodimensionnelle), ce qui permet de présenter les différentes conditions limites et discrétisations de bord utilisables. On montre alors que certains couples peuvent rendre la méthode numérique instable et causer la divergence du calcul, ce que la méthode de Von Neumann, en domaine infini périodique, n'aurait pas permis de prédire. Par ailleurs, on met aussi en évidence un phénomène inquiétant : les schémas d'ordre élevé peuvent devenir moins précis globalement que les schémas *a priori* moins précis.

On introduit donc les principes de la méthode de la matrice d'amplification, ainsi que son lien avec la méthode de Von Neumann, lorsque le domaine étudié est périodique. En appliquant la méthode de la matrice aux schémas d'AVBP, on met ainsi en évidence les raisons de la divergence des calculs et les couples conditions limites - schémas de bord les plus satisfaisants. On fournit alors ce qui semblent être

les raisons pour lesquelles les schémas d'ordre élevé sont moins précis et on propose une solution pour remédier au problème, en utilisant la matrice d'amplification.

On rappelle que les schémas de convection, qu'on étudie ici, sont construits à partir de la méthode de Lax-Wendroff (ou Taylor-Galerkin), ce qui fait apparaître des dérivées spatiales d'ordre 2 (voir section 4.4). Pour les noeuds de bords, ces dérivées d'ordre 2 se décomposent en deux parties (voir équation (4.134)) : la première $\mathbf{LL}_j^0(\mathbf{U}^n)$ provient de l'intérieur du domaine de calcul et la seconde $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}^n)$ est liée à la frontière $\partial\Omega$ avec l'extérieur. On peut traiter la dérivée d'ordre 2 de deux manières, comme présenté section 4.12 :

- **Formulation USOT** : On annule le terme $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}^n)$ pour le noeud de bord.
- **Formulation CSOT** : Toute la contribution liée aux dérivées spatiales d'ordre 2 est annulée pour le noeud de bord. Cela revient à dire que l'intégration temporelle au bord est du type Euler explicite et la discrétisation spatiale est décentrée d'ordre 1.

6.1 Cavité acoustique 1D

6.1.1 Présentation du problème

Le problème¹ présenté ici est similaire au cas périodique (air au repos, pression et température ambiantes) décrit dans le chapitre 6 mais des murs ont été ajoutés de part et d'autre du domaine. Afin de garder un nombre de point par longueur d'onde similaire, on choisit $N_h = 15$ (soit $N = 14$). On étudie l'évolution temporelle du premier mode acoustique (demi-onde) d'une cavité monodimensionnelle. Le point de mesure de la pression se situe au bord et la figure 6.1 présente le problème étudié.

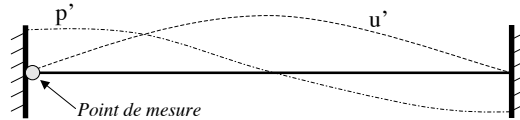


FIG. 6.1 - Schéma de présentation du problème de la cavité acoustique monodimensionnelle.

Le champ initial de vitesse est le suivant :

$$u' = \frac{\mathcal{A}}{\bar{\rho}c} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad \text{et} \quad L = 1 \text{ m}, \mathcal{A} = 100 \text{ Pa.}$$

La pression est constante et égale à $\bar{p} = 1\text{bar}$ à $t = 0$.

Ce cas académique est réalisé afin de fournir des réponses aux questions suivantes :

1. Quelle est l'influence des bords sur la stabilité et la précision ?
2. Quel type de condition limite faut-il utiliser ?
3. Quelle importance a le choix des termes de bord et la précision des dérivées ?

Pour répondre à ces questions, on utilisera les schémas numériques LW et TTGC avec deux types de fermeture des termes de bords et deux types de conditions limites pour modéliser les parois de la cavité. Les cas étudiés sont répertoriés dans le tableau 6.1.1.

¹Ce travail a été effectué en collaboration avec Mauro Porta.

Cas	Schéma	Fermeture aux bords	Conditions limites
LW-A	LW	USOT	Dirichlet
LW-B	LW	CSOT	Dirichlet
LW-C	LW	USOT	NSCBC
LW-D	LW	CSOT	NSCBC
TTGC-A	TTGC	USOT	Dirichlet
TTGC-B	TTGC	CSOT	Dirichlet
TTGC-C	TTGC	USOT	NSCBC
TTGC-D	TTGC	CSOT	NSCBC

TAB. 6.1 - Différents cas et paramètres utilisés pour l'étude du mode acoustique dans la cavité monodimensionnelle.

6.1.2 Résultats avec le code AVBP

Lax-Wendroff

Les figures 6.2 et 6.3 présentent la variation de la pression au point de mesure indiqué sur la figure 6.1.

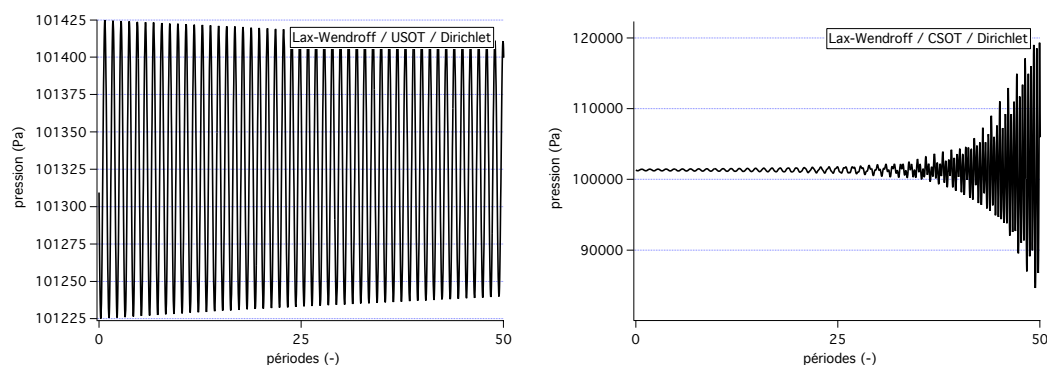


FIG. 6.2 - Variation temporelle de la pression dans la cavité (condition limite de type Dirichlet). A gauche : cas LW-A. A droite : cas LW-B.

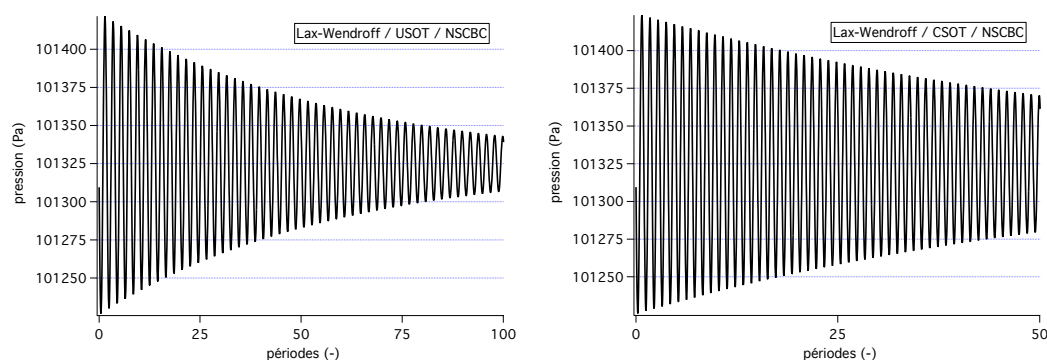


FIG. 6.3 - Variation temporelle de la pression dans la cavité (condition limite de type NSCBC). A gauche : cas LW-C. A droite : cas LW-D.

On peut faire les remarques suivantes :

- les résultats obtenus avec les conditions caractéristiques sont plus dissipés dans le temps que leurs homologues avec conditions de Dirichlet.
- le couple CSOT / Dirichlet est très instable et, par conséquent, ne peut être utilisé pour une simulation numérique.
- les solutions "avec bords" sont globalement plus dissipées que les résultats obtenus sur un domaine périodique.

La différence en termes de dissipation entre conditions de Dirichlet et conditions caractéristiques peut s'expliquer de la manière suivante : les dérivées aux bords sont traitées avec des approximations d'ordre 1 en espace. Pour une condition de Dirichlet, la valeur de la vitesse au bord est fixée, les autres variables sont libres et donc avancées en temps, grâce aux dérivées et résidus, précis à l'ordre 1. Dans le cas du traitement caractéristique, la vitesse n'est pas fixée. Elle est traitée (ainsi que l'énergie totale, pour la pression) avec des variations caractéristiques (cf. section 4.12), utilisant les gradients aux bords, donc précisés à l'ordre 1. Au final, il y a donc plus d'approximations d'ordre faible intervenant dans les calculs avec les conditions caractéristiques, ce qui peut expliquer la dissipation plus importante. Le même raisonnement est valable pour le cas périodique, celui-ci est moins dissipé car aucune approximation d'ordre 1 en espace n'est utilisée dans le calcul.

On peut aussi fournir une raison de l'erreur très importante générée dans le cas LW-B. En utilisant le modèle CSOT, on supprime la contribution LW, c'est-à-dire les dérivées spatiales d'ordre 2 (cf. section 4.12). La conséquence est d'obtenir, de chaque côté, une intégration temporelle de type Euler explicite et des schémas décentrés. Selon l'onde acoustique considérée, ces schémas décentrés sont tantôt amont, tantôt aval. Or, un schéma aval est inconditionnellement instable, ce qui entraîne vraisemblablement la déstabilisation observée dans le calcul quand $t \rightarrow \infty$.

TTGC

On procède à la même analyse avec le schéma TTGC. Les figures 6.4 et 6.5 présentent la variation de la pression au même point de mesure.

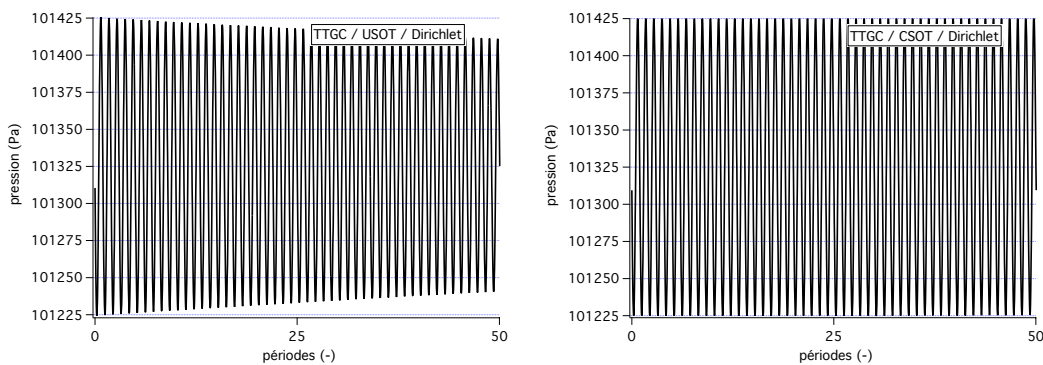


FIG. 6.4 - Variation temporelle de la pression dans la cavité (condition limite de type Dirichlet). A gauche : cas TTGC-A. A droite : cas TTGC-B.

Les mêmes remarques que pour les cas LW-A,B,C,D s'appliquent ici pour le schéma TTGC. Certaines peuvent être ajoutées également :

- La dissipation est plus importante pour le schéma TTGC que pour le schéma LW, ce qui est en opposition avec tout ce qui a été dit et démontré, dans les chapitres précédents, pour les cas périodiques.

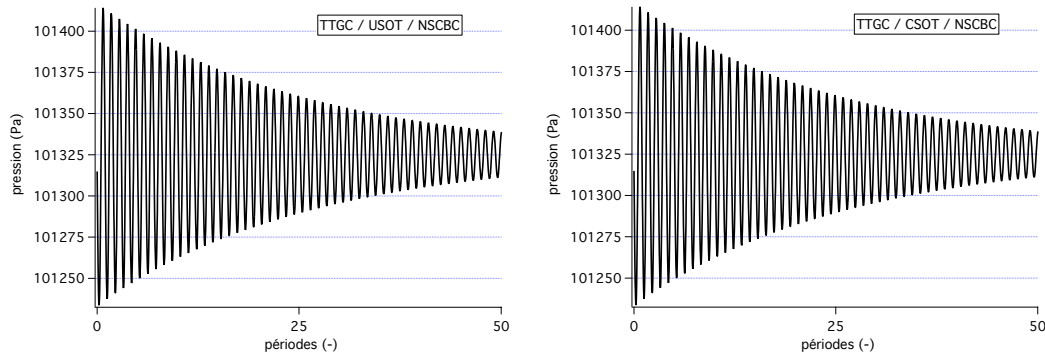


FIG. 6.5 - Variation temporelle de la pression dans la cavité (condition limite de type NSCBC). A gauche : cas TTGC-C. A droite : cas TTGC-D.

- Bien que semblant marginalement stable (pas de dissipation), le cas TTGC-B est bel et bien instable, le taux de croissance est strictement supérieur à 1.

Le schéma TTGC est plus dissipatif, dans cette configuration, que le schéma LW, pour les mêmes raisons que la condition NSCBC l'est plus que la condition de Dirichlet. En effet, le schéma TTGC est calculé en deux fois (prédiction puis correction) et les conditions limites sont appliquées aux deux étapes. Ceci entraîne que le nombre d'approximations d'ordre faible utilisées pour une itération avec TTGC est deux fois plus grand que pour LW. Il n'est donc pas étonnant d'obtenir ce résultat.

Le peu de sensibilité de TTGC, au choix du terme de bord en comparaison de LW, est lié à la part que prend la dérivée d'ordre 2 dans le calcul du résidu. Compte tenu des coefficients utilisés devant les dérivées pour construire TTGC et de l'étude spectrale réalisée au chapitre 5, ce schéma est très peu dissipatif. L'avancement dépend, en effet, très peu des termes $\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}^n)$ et, par conséquent, du terme de bord. En comparaison, les mêmes tests ont été menés avec le schéma TTG4A, celui-ci dépendant beaucoup plus de $\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}^n)$, il est, de ce fait, encore plus instable que LW dans le cas CSOT / Dirichlet !

6.1.3 Différences entre les conditions limites

Type de traitement des murs adiabatiques

Les deux conditions limites simulant des murs adiabatiques sont censées faire la même chose : physiquement, il s'agit d'imposer une vitesse normale nulle et donc une réflexion totale d'une onde acoustique incidente². Les résultats sont pourtant bien différents, comme le montre les résultats du paragraphe 6.1.2. On va donc s'intéresser, plus précisément, au traitement des conditions limites, afin de déterminer quel choix est à préconiser. Pour ce faire, on étudie, en particulier, l'avancement temporel de l'équation de continuité au bord.

Condition de Dirichlet Comme on l'a évoqué dans le paragraphe 4.12, on utilise le schéma numérique pour modifier la masse volumique au bord et aucune modification n'est réalisée par la condition

²On étudie ici un cas isentropique

limite. Ceci revient à écrire :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u}{\partial x} = -\left(\underbrace{u \frac{\partial \rho}{\partial x}}_{\text{nul car } u=0} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} \right) = -\rho \frac{\partial u}{\partial x} \quad (6.1)$$

Traitement par ondes caractéristiques De la même manière, on écrit l'avancement de ρ par le traitement caractéristique. D'après [176] :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\left(\rho \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{c} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (6.2)$$

Yoo et Im [261] ont introduit la notion de "condition limite effective", afin de distinguer ce que le code résout et ce que la théorie physique prédit réellement. En effet, en théorie, sur un mur, $\frac{\partial p}{\partial x} = 0$ et les équations (6.1) et (6.2) sont équivalentes. En pratique, cela n'est pas le cas et le traitement des deux conditions limites est différent ! Le terme $\frac{1}{c} \frac{\partial p}{\partial x}$, nommé par Porta [180] "terme ABC" (pour *additional boundary correction*) a, comme on l'évoquera par la suite, un rôle stabilisateur donc très important.

Une remarque sur le choix de la formulation aux bords avec les conditions caractéristiques

On rappelle que le calcul des ondes peut être effectué suivant deux méthodologies (section 4.12). Un test simple mené par Porta [180] montre que le calcul des ondes effectué par le code est erroné, lorsque qu'on utilise la formulation USOT avec le traitement caractéristique temporel (type Thompson), souvent préféré pour les entrées (et *a fortiori* les murs caractéristiques). Les ondes sont, en effet, calculées à partir du résidu. On peut donc en conclure qu'avec la formulation USOT, le résidu est inexact. En revanche, si la formulation CSOT est adoptée, le calcul des ondes est exact.

Il est à noter que ce problème n'apparaît pas avec la formulation spatiale, puisque les ondes sont déterminées à partir des gradients (le résidu n'intervient pas).

6.2 Méthode de la matrice d'amplification

6.2.1 Principe

Cette méthode est applicable aux domaines périodiques (et fournit alors des informations équivalentes aux analyses Fourier ou de Von Neumann), mais elle devient intéressante dès lors qu'on considère des bords et les conditions limites. On présente le principe de cette méthode pour le schéma Lax-Wendroff appliqué à l'équation de convection linéaire monodimensionnelle (5.1) sur un domaine périodique (on a donc $U_0^n = U_N^n$). Le but est de construire la matrice d'amplification qu'on notera $[Q]$, afin de pouvoir écrire :

$$\{U^{n+1}\} = [Q]\{U^n\} \quad (6.3)$$

$\{U^n\}$ est le vecteur contenant l'ensemble des variables à la n-ième itération temporelle et :

$$\{U^n\} = (U_1^n, \dots, U_{j-1}^n, U_j^n, U_{j+1}^n, \dots, U_N^n)$$

En écrivant explicitement l'avancement temporel H du schéma étudié à chaque noeud j :

$$U_j^{n+1} = HU_j = \frac{1}{2}\nu(1+\nu)U_{j-1}^n + (1-\nu^2)U_j^n + \frac{1}{2}\nu(-1+\nu)U_{j+1}^n \quad (6.4)$$

On construit la matrice $[Q] \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ ligne après ligne. Pour la convection linéaire 1D résolue par le schéma LW sur un domaine périodique, on obtient :

$$[Q] = \begin{pmatrix} (1-\nu^2) & \frac{1}{2}\nu(-1+\nu) & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \frac{1}{2}\nu(1+\nu) \\ \frac{1}{2}\nu(1+\nu) & (1-\nu^2) & \frac{1}{2}\nu(-1+\nu) & 0 & \cdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \frac{1}{2}\nu(1+\nu) & (1-\nu^2) & \frac{1}{2}\nu(-1+\nu) & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \frac{1}{2}\nu(1+\nu) & (1-\nu^2) & \frac{1}{2}\nu(-1+\nu) \\ \frac{1}{2}\nu(-1+\nu) & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{1}{2}\nu(1+\nu) & (1-\nu^2) \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

6.2.2 Etude de stabilité

Afin de déterminer les conditions de stabilité en norme L^2 de la méthode numérique, on étudie le spectre de la matrice $[Q]$. Une condition nécessaire³ de stabilité est :

$$\rho([Q]) \leq 1$$

En effet, on peut décomposer la solution initiale comme une combinaison linéaire des vecteurs propres de $[Q]$ soit :

$$\{U^0\} = \sum_{k=1}^N \alpha_k \{V\}_k$$

Pour un schéma stable et dissipatif, on note par convention les valeurs propres de $[Q]$ par décroissance :

$$1 = |\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots > |\lambda_m| \geq \cdots \geq |\lambda_k| \cdots \geq |\lambda_N|$$

ce qui signifie qu'on appellera λ_m la première valeur propre inférieure strictement à 1. Si le schéma est instable, λ_m sera la dernière valeur propre strictement inférieure à 1.

Après n itérations, n étant un entier suffisamment grand, on obtient, pour un schéma stable :

$$\begin{aligned} \{U^{n+1}\} &= [Q]\{U^n\} \\ &= [Q]^n\{U^0\} \\ &= \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k \lambda_k^n \{V\}_k + \lambda_m^n \left(\alpha_m \{V\}_m + \sum_{k=m+1}^N \alpha_k \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_m} \right)^n \{V\}_k \right) \\ &= \underbrace{\sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k^n \{V\}_k}_{\text{"solution stationnaire"}} + \lambda_m^n \alpha_m \{V\}_m + \cdots \end{aligned}$$

Le premier terme qu'on a désigné "solution stationnaire" correspond à la solution obtenue quand $n \rightarrow \infty$ car les valeurs propres correspondantes sont unitaires dans le cas stable. On notera que dans les tests

³Sous certaines conditions de symétrie de $[Q]$, la norme L^2 et le rayon spectral sont égaux, la condition devient aussi suffisante. Le lecteur peut trouver des précisions dans [100] ou [8].

étudiés par la suite (fluctuations acoustiques), ce terme sera nul (toujours dans le cas stable). Les termes en $\left(\frac{\lambda_k}{\lambda_m}\right)^n$ tendent vers 0 pour toute valeur propre λ_k strictement inférieure à λ_m . Ainsi, dans le cas d'un schéma stable, la solution est dissipée et le module de λ_m indique donc un taux de décroissance de la solution. En utilisant un raisonnement similaire pour un schéma instable, on utilisera la plus grande valeur propre pour déterminer le taux d'accroissement.

Comme le souligne Hirsch [100], les vecteurs propres, obtenus lors de l'étude d'un schéma sur un domaine périodique, correspondent aux $e^{2ij\pi/N}$ avec $0 \leq j \leq N - 1$, c'est-à-dire les modes utilisés dans l'analyse spectrale et les valeurs propres sont les coefficients d'amplification correspondants. Ainsi, le module des valeurs propres fournit un renseignement sur la dissipation introduite par le schéma et les erreurs de dispersion peuvent être déterminées à l'aide de l'argument.

6.2.3 En pratique...

Dans certains cas particuliers, comme la matrices périodique (6.5), il existe des théorèmes permettant de déterminer ou de majorer les valeurs propres de la matrice $[Q]$. Dans l'étude qui suit, néanmoins, trouver analytiquement les valeurs de $[Q]$ n'est pas envisageable. On a choisi de les déterminer à l'aide d'un code de calcul écrit sous SCILAB. Le domaine de stabilité est donc obtenu numériquement.

On précise enfin la construction d'une matrice d'amplification sur un domaine non périodique. Lorsque la condition limite imposée aux noeuds 0 et/ou N est de type Dirichlet, on supprime les lignes correspondant à ces noeuds, dans la matrice et dans le vecteur solution, car ce ne sont plus des degrés de liberté du problème.

6.3 Application aux schémas d'AVBP

6.3.1 Equations d'Euler linéarisées

Pour réaliser l'étude du mode acoustique dans une cavité monodimensionnelle, on part des équations d'Euler :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho E u}{\partial x} + \frac{\partial p u}{\partial x} = 0 \quad (6.8)$$

où ρ est la masse volumique, u la vitesse, p la pression et $E = e + 1/2 u^2$ l'énergie totale. On se place dans le cas d'un gaz parfait donc : $p = \rho r T$ avec T la température.

Par hypothèse, on considère l'écoulement isentropique et que $\bar{u} = 0$. Après linéarisation autour de l'état

stationnaire (toute grandeur se décompose de la manière suivante : $X(x, t) = \bar{X} + X'(x, t)$), on obtient :

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \bar{\rho} \frac{\partial u'}{\partial x} = 0 \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + \frac{c^2}{\bar{\rho}} \frac{\partial \rho'}{\partial x} = 0 \quad (6.10)$$

où $c^2 = \frac{p'}{\rho'}$ est la vitesse du son.

Pour la suite, **on s'affranchira de l'exposant X'** pour alléger quelque peu les notations. En revanche, on garde les barres $\bar{X}$ pour désigner l'état stationnaire.

6.3.2 Discrétisation au centre du domaine

On applique la méthode de Lax-Wendroff telle qu'on l'a décrite chapitre 4 au vecteur $\mathbf{U} = (\rho, u)^T$. Le développement en temps autour de $t = t^n$ est donné par :

$$\rho^{n+1} = \rho^n + \Delta t \left. \frac{\partial \rho}{\partial t} \right|^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left. \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} \right|^n + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (6.11)$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|^n + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (6.12)$$

En utilisant les équations (6.9) et (6.10) dans (6.11) et (6.12), on obtient :

$$\rho_i^{n+1} \simeq \rho_i^n - \bar{\rho} \Delta t \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i^n + \frac{1}{2} c^2 \Delta t^2 \left. \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right|_i^n \quad (6.13)$$

$$u_i^{n+1} \simeq u_i^n - \frac{c^2}{\bar{\rho}} \Delta t \left. \frac{\partial \rho}{\partial x} \right|_i^n + \frac{1}{2} c^2 \Delta t^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i^n \quad (6.14)$$

ce qui donne après discrétisation spatiale suivant la méthode *cell-vertex*⁴ :

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} \Delta_0 U_i^n + \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} \delta^2 \rho_i^n \quad (6.15)$$

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} h} \Delta_0 \rho_i^n + \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} \delta^2 U_i^n \quad (6.16)$$

On écrit la matrice pour le système d'équations (6.13)-(6.14). On choisit d'écrire le vecteur solution de la manière suivante :

$$\{\mathbf{U}\} = (\rho_0, U_0, \dots, \rho_{j-1}, U_{j-1}, \rho_j, U_j, \rho_{j+1}, U_{j+1}, \dots, \rho_N, U_N)^T$$

⁴Pour ρ , on ne fait aucune distinction typologique entre la solution des équations (6.9)-(6.10) et les variables discrètes.

ce qui donne pour le schéma au centre du domaine de calcul :

$$[\mathbf{Q}]_c = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \dots & \dots \\ \dots & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 0 & \dots \\ \dots & 0 & \frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 0 \\ \dots & \dots & 0 & \frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

Il reste maintenant à remplir les lignes du haut et du bas, c'est-à-dire prendre en compte les schémas de bord et les conditions limites. On peut, par ailleurs, noter que la matrice du schéma de centre peut s'écrire :

$$[\mathbf{Q}]_c = [\mathbf{Q}]_{CV} + [\mathbf{Q}]_{LW}$$

où $[\mathbf{Q}]_{CV}$ est la matrice d'amplification pour le schéma aux différences centrées d'ordre 2 et $[\mathbf{Q}]_{LW}$ représente la contribution Lax-Wendroff.

6.3.3 Conditions limites et termes de bord

On présente la construction de la matrice $[\mathbf{Q}]$ pour deux types de schémas de bord et deux formulations de la condition limite "mur". Celle-ci s'écrit comme la somme des contributions du centre du domaine et des bords.

$$[\mathbf{Q}] = [\mathbf{Q}]_c + [\mathbf{Q}]_b \quad (6.18)$$

où la matrice $[\mathbf{Q}]_c$ contient les composantes pour le schéma partout dans le domaine de calcul, sauf aux bords (ou on remplace par des lignes de zéros). La matrice $[\mathbf{Q}]_b$ est remplie de zéros sauf aux premières et dernières lignes. Elle contient les informations relatives aux schémas de bords et aux conditions limites. Dans les cas avec conditions limites de type Dirichlet $u' = 0$, on supprime U_0 et U_N du vecteur solution car ce ne sont plus des degrés de liberté. On a alors $[\mathbf{Q}] \in \mathcal{M}_{2N}(\mathbb{R})$.

Pour les cas avec conditions limites caractéristiques, on garde toutes les composantes du vecteur solution, comme on va le voir. Ainsi on a $[\mathbf{Q}] \in \mathcal{M}_{2N+2}(\mathbb{R})$.

Schéma de bord pour les dérivées du premier ordre

Le noeud de bord à gauche (*resp. à droite*) n'a pas de voisin à sa gauche (*resp. à droite*), ce qui oblige à exprimer $\frac{\partial}{\partial x}$ à l'aide de différences décentrées. Ainsi, on a pour :

– En $x = 0$: décentrement aval

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_0 \approx \frac{U_1 - U_0}{h}$$

– En $x = 1$: décentrement amont

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_N \approx \frac{U_N - U_{N-1}}{h}$$

et le même type d'approximations s'applique à ρ .

Termes de bord pour la dérivée d'ordre 2

On teste ici les deux types de fermeture présentés section 4.12 pour la dérivée seconde. Les valeurs "prédites" au bord par le schéma numérique sont donc les suivantes :

- *CSOT* : On annule complètement la contribution due au schéma LW pour le noeud du bord (ce qui revient à avoir une intégration temporelle de type Euler). Il n'y a plus de dérivée seconde aux bords, ce qui donne pour les noeuds concernés (en prenant la densité comme exemple) :

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{jb} \simeq 0 \quad (6.19)$$

$$\rho_{jb}^{n+1} \simeq \rho_{jb}^n - \bar{\rho} \Delta t \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{jb}^n \quad (6.20)$$

où l'indice jb est égal à 0 ou à N .

- *USOT* : Le terme de bord est nul. Ainsi l'expression de la dérivée seconde aux bords est la suivante (Attention, le volume de contrôle d'un noeud de bord est $h/2$, d'où le facteur 2) :

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_0 \approx 2 \frac{U_1 - U_0}{h^2} \quad (6.21)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_N \approx 2 \frac{U_{N-1} - U_N}{h^2} \quad (6.22)$$

Condition de type Dirichlet

Compte tenu du problème étudié, la condition limite dans le cas Dirichlet s'écrit :

$$U_0^n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}^* \quad (6.23)$$

$$U_N^n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}^* \quad (6.24)$$

$$\rho_{0,C}^{n+1} = \rho_{0,P}^{n+1} \quad (6.25)$$

$$\rho_{N,C}^{n+1} = \rho_{N,P}^{n+1} \quad (6.26)$$

où l'indice P fait référence à la valeur prédite par le schéma numérique et l'indice C correspond à la valeur corrigée par la condition limite.

Condition caractéristique - NSCBC

On peut réécrire le système (6.9) et (6.10) sous la forme matricielle :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (6.27)$$

et la matrice jacobienne $\mathbf{A}$ est la suivante :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{\rho} \\ \frac{c^2}{\bar{\rho}} & 0 \end{pmatrix}$$

Le calcul des valeurs propres de la jacobienne donne :

$$\lambda_+ = +c \quad , \quad \lambda_- = -c$$

avec respectivement pour vecteur propre à gauche associé :

$$\mathbf{l}_+ = (1, \frac{\bar{\rho}}{c}) \quad , \quad \mathbf{l}_- = (1, -\frac{\bar{\rho}}{c})$$

Les ondes acoustiques s'écrivent donc :

$$\mathcal{L}_+ = c \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\bar{\rho}}{c} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (6.28)$$

$$\mathcal{L}_- = -c \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\bar{\rho}}{c} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (6.29)$$

Ainsi l'onde $\mathcal{L}_+$ (*resp.* $\mathcal{L}_-$) est l'onde acoustique se dirigeant vers les x positifs (*resp.* négatifs). En utilisant la méthodologie NSCBC, on peut réécrire (6.27) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + d_1 = 0 \quad (6.30)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + d_2 = 0 \quad (6.31)$$

où :

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) \\ \frac{c}{2\bar{\rho}}(\mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_-) \end{pmatrix}$$

La condition de mur se traduit alors par : $\mathcal{L}_+ = \mathcal{L}_-$, ce qui revient à dire que l'onde acoustique entrant dans le domaine Ω est égale à l'onde sortante (réflexion acoustique totale). Les équations (6.30) et (6.31) deviennent alors :

– En $x = 0$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{L}_- = 0 \quad (6.32)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0 \quad (6.33)$$

– En $x = 1$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{L}_+ = 0 \quad (6.34)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0 \quad (6.35)$$

6.3.4 Discrétisations aux bords

On explicite maintenant l'écriture des matrices $[\mathbf{Q}]_b$ pour les différents couples schémas de bord / conditions limites.

CSOT + Dirichlet

Le vecteur solution s'écrit :

$$\{\mathbf{U}\} = (\rho_0, \rho_1, U_1, \dots, \rho_{N-1}, U_{N-1}, \rho_N)^T.$$

En tenant compte des conditions limites sur u , on a les schémas de bord suivant :

A gauche :

$$\rho_0^{n+1} = \rho_0^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_1^n - U_0^n) \quad (6.36)$$

$$\rho_1^{n+1} = \rho_1^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{2h}(U_2^n - U_0^n) + \frac{1}{2}\frac{c^2\Delta t^2}{h^2}(\rho_2^n - 2\rho_1^n + \rho_0^n) \quad (6.37)$$

$$U_1^{n+1} = U_1^n - \frac{c^2\Delta t}{2\rho h}(\rho_2^n - \rho_0^n) + \frac{1}{2}\frac{c^2\Delta t^2}{h^2}(U_2^n - 2U_1^n + U_0^n) \quad (6.38)$$

A droite :

$$\rho_{N-1}^{n+1} = \rho_{N-1}^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{2h}(U_N^n - U_{N-2}^n) + \frac{1}{2}\frac{c^2\Delta t^2}{h^2}(\rho_N^n - 2\rho_{N-1}^n + \rho_{N-2}^n) \quad (6.39)$$

$$U_{N-1}^{n+1} = U_{N-1}^n - \frac{c^2\Delta t}{2\rho h}(\rho_N^n - \rho_{N-2}^n) + \frac{1}{2}\frac{c^2\Delta t^2}{h^2}(U_N^n - 2U_{N-1}^n + U_{N-2}^n) \quad (6.40)$$

$$\rho_N^{n+1} = \rho_N^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_N^n - U_{N-1}^n) \quad (6.41)$$

On obtient alors la matrice pour les bords :

$$[\mathbf{Q}]_b = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{1}{2}\frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & 1 - \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & 0 & \frac{1}{2}\frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{2h} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{c^2\Delta t}{\bar{\rho}2h} & 0 & 1 - \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & -\frac{c^2\Delta t}{\bar{\rho}2h} & \frac{1}{2}\frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{2}\frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{2h} & 1 - \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & 0 & \frac{1}{2}\frac{c^2\Delta t^2}{h^2} \\ 0 & \dots & 0 & \frac{c^2\Delta t}{\bar{\rho}2h} & \frac{1}{2}\frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & 0 & 1 - \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & -\frac{c^2\Delta t}{\bar{\rho}2h} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 1 \end{pmatrix} \quad (6.42)$$

USOT + Dirichlet

Le vecteur solution est le même que précédemment, c'est-à-dire qu'il ne contient ni U_0 , ni U_N . Par rapport au schéma précédent, seules les équations (6.36) et (6.41) sont modifiées. Elles s'écrivent alors :

A gauche :

$$\rho_0^{n+1} = \rho_0^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_1^n - U_0^n) + \frac{c^2\Delta t^2}{h^2}(\rho_1^n - \rho_0^n) \quad (6.43)$$

A droite :

$$\rho_N^{n+1} = \rho_N^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_N^n - U_{N-1}^n) + \frac{c^2\Delta t^2}{h^2}(\rho_{N-1}^n - \rho_N^n) \quad (6.44)$$

La matrice d'amplification des schémas de bord est identique à la matrice (6.42), à l'exception de la première et de la dernière ligne.

$$[\mathbf{Q}]_b = \begin{pmatrix} 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} \end{pmatrix} \quad (6.45)$$

CSOT + NSCBC

On s'intéresse désormais au cas des conditions limites de type caractéristique. Le vecteur solution contient ici toutes les inconnues du problème et s'écrit :

$$\{\mathbf{U}\} = (\rho_0, U_0, \rho_1, U_1, \dots, \rho_{N-1}, U_{N-1}, \rho_N, U_N)^T.$$

Seules les deux premières (ρ_0, U_0) et les deux dernières lignes (ρ_N, U_N) sont traitées dans $[\mathbf{Q}]_b$. La discrétisation à gauche s'écrit :

$$\rho_0^{n+1} = \rho_0^n - \frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} (U_1^n - U_0^n) + \frac{c \Delta t}{h} (\rho_1^n - \rho_0^n) \quad (6.46)$$

$$U_0^{n+1} = U_0^n \quad (6.47)$$

La discrétisation à droite s'écrit :

$$\rho_N^{n+1} = \rho_N^n - \frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} (U_N^n - U_{N-1}^n) - \frac{c \Delta t}{h} (\rho_N^n - \rho_{N-1}^n) \quad (6.48)$$

$$U_N^{n+1} = U_N^n \quad (6.49)$$

On obtient alors la matrice :

$$[\mathbf{Q}]_b = \begin{pmatrix} 1 - \frac{c \Delta t}{h} & \frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} & \frac{c \Delta t}{h} & -\frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{c \Delta t}{h} & \frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} & 1 - \frac{c \Delta t}{h} & -\frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.50)$$

USOT + NSCBC

Le vecteur solution contient encore toutes les inconnues du problème et s'écrit :

$$\{\mathbf{U}\} = (\rho_0, U_0, \rho_1, U_1, \dots, \rho_{N-1}, U_{N-1}, \rho_N, U_N)^T.$$

Seules les deux premières (ρ_0, U_0) et les deux dernières lignes (ρ_N, U_N) sont traitées dans $[\mathbf{Q}]_b$. La discrétisation à gauche s'écrit :

$$\rho_0^{n+1} = \rho_0^n - \frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} (U_1^n - U_0^n) + \frac{c \Delta t}{h} (\rho_1^n - \rho_0^n) + \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} (\rho_1^n - \rho_0^n) \quad (6.51)$$

$$U_0^{n+1} = U_0^n \quad (6.52)$$

La discrétisation à droite s'écrit :

$$\rho_N^{n+1} = \rho_N^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_N^n - U_{N-1}^n) - \frac{c\Delta t}{h}(\rho_N^n - \rho_{N-1}^n) + \frac{c^2\Delta t^2}{h^2}(\rho_{N-1}^n - \rho_N^n) \quad (6.53)$$

$$U_N^{n+1} = U_N^n \quad (6.54)$$

On obtient alors la matrice :

$$[\mathbf{Q}]_b = \begin{pmatrix} 1 - \frac{c\Delta t}{h} - \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & \frac{c\Delta t}{h} + \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{c\Delta t}{h} + \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 1 - \frac{c\Delta t}{h} - \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.55)$$

6.4 Résultats et comparaisons avec AVBP

La matrice d'amplification peut être utilisée comme un outil d'analyse permettant l'étude *a priori* des schémas numériques, avec ou sans les conditions limites. Ici, on ne montre pas les résultats obtenus pour les cas périodiques, car les valeurs propres de la matrice n'apportent pas de renseignement supplémentaire, par rapport à l'étude du coefficient d'amplification. On présente donc les résultats avec conditions limites.

6.4.1 Conditions de Dirichlet

La figure 6.6 présente les valeurs propres des matrices d'amplification du schéma LW avec conditions limites de type Dirichlet dans le plan complexe. Le disque de rayon 1, ayant pour centre l'origine, indique les limites de stabilité. Comme le montre le zoom en bas à gauche de la figure 6.6, certaines valeurs propres sont de module supérieur à 1 dans le cas LW-B, ce qui explique pourquoi on observe une divergence de la pression. Plusieurs calculs à différents CFL tendent d'ailleurs à faire penser que la combinaison CSOT+Dirichlet est instable inconditionnellement.

La figure 6.7 fournit une comparaison entre la pression dans AVBP et le taux de décroissance théorique, égal au module de la valeur propre λ_m pour le cas LW-A et indique la croissance de l'instabilité numérique dans le cas LW-B. On peut donc constater que la méthode de la matrice permet de retrouver les taux de décroissance et croissance de la pression d'AVBP, dans les deux cas.

6.4.2 Conditions caractéristiques

On reproduit les mêmes comparaisons dans le cas où les conditions limites sont caractéristiques.

La figure 6.8 indique où se trouvent les valeurs propres des matrices d'amplification des cas LW-C et D dans le plan complexe. Comme on peut le voir, d'une manière globale, les valeurs propres du cas C (USOT) ont des modules légèrement inférieurs à celles du cas D (CSOT), en particulier λ_m . Il n'est donc pas étonnant, en voyant la figure 6.9, que le cas C soit plus dissipé.

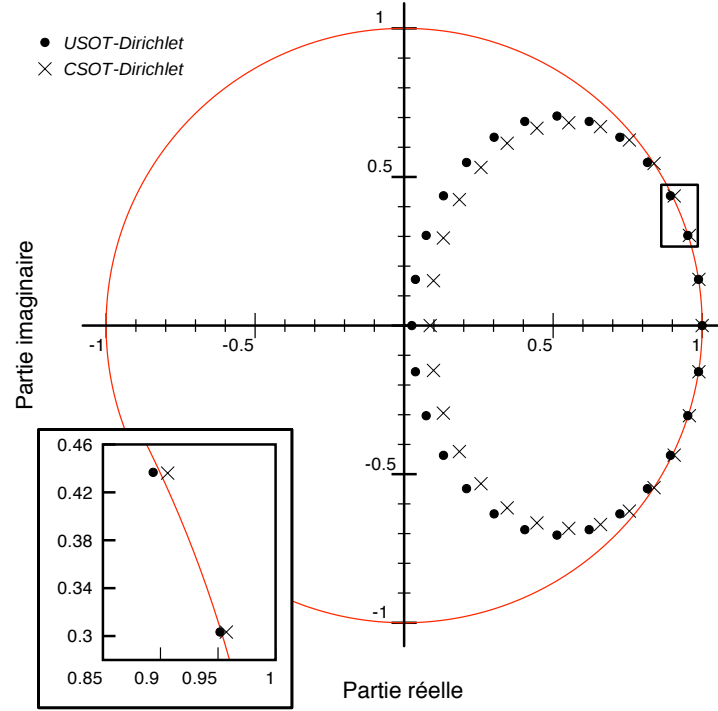


FIG. 6.6 - Parties réelles et imaginaires des valeurs propres λ_k de la matrice d'amplification $[Q]$ pour les conditions limites de type Dirichlet (• : LW-A ; × : LW-B).

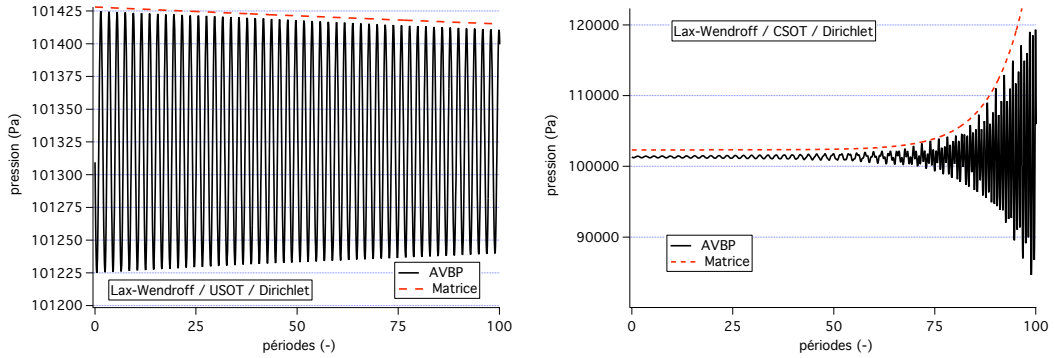


FIG. 6.7 - Comparaison entre la variation de pression fournie par AVBP et le taux de variation indiqué par la méthode de la matrice. A gauche : cas LW-A. A droite : cas LW-B.

On a, de plus, cherché à mettre en évidence l'utilité du terme ABC évoqué à la section 6.1 (on rappelle qu'il s'agit du terme faisant intervenir la dérivée de la densité, théoriquement nulle) et apparaissant sous la forme de $\pm \frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} (\rho_{1/N}^n - \rho_{0/N-1}^n)$ dans le calcul de $\rho_{0/N}^{n+1}$. Pour ce faire, on a calculé les valeurs de la matrice du cas CSOT + NSCBC sans ce terme. Le résultat obtenu est alors similaire au cas CSOT+DIRIC, c'est-à-dire plusieurs valeurs propres de modules supérieurs à 1. Le terme ABC a donc un rôle prépondérant puisqu'il stabilise le calcul.

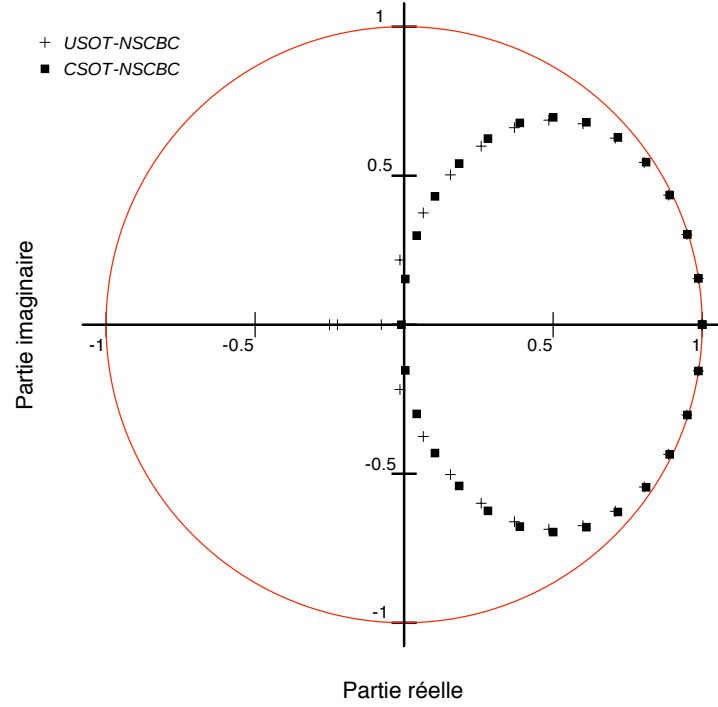


FIG. 6.8 - Parties réelles et imaginaires des valeurs propres λ_k de la matrice d'amplification $[Q]$ pour les conditions limites caractéristiques (+ : LW-C; carrés pleins : LW-D)

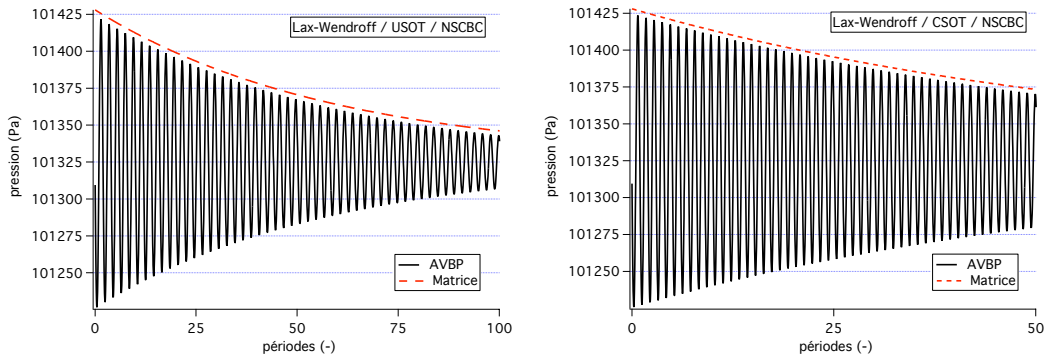


FIG. 6.9 - Comparaison entre la variation de pression fournie par AVBP et le taux de variation indiqué par la méthode de la matrice. A gauche : cas LW-C. A droite : cas LW-D.

6.4.3 Conclusion

La matrice d'amplification est donc un outil de prédiction puissant, permettant de déterminer si un schéma numérique est stable ou non, en tenant compte de la discrétisation aux bords et des conditions limites. On peut donc s'en servir pour tester d'autres méthodes, avant d'envisager les implanter dans un code, sachant que ce dernier travail est souvent long et fastidieux.

Au vu des figures 6.8 et 6.9, on constate que la modélisation des parois rigides par des conditions caractéristiques présente un défaut non négligeable, par rapport aux traditionnelles conditions de Dirichlet : elles dissipent beaucoup plus. Cette dissipation leur permet aussi d'être beaucoup plus stables

(le cas CSOT+DIRIC diverge !). Dans le cas du schéma LW, ce gain en robustesse compense la perte en précision. Toutefois, dès lors qu'on utilise les schémas TTG plutôt que LW, cette perte de précision peut devenir très contraignante. En effet, la diffusion peut sembler excessive dans les cas présentés dans la section 6.1. Dans la section suivante, on va donc montrer une solution envisageable, évaluée avec la méthode de la matrice d'amplification, pour pallier à ce problème de diffusion trop élevée.

6.5 Améliorations possibles de la précision globale des schémas

6.5.1 Dérivées premières plus précises

Seul le cas CSOT + NSCBC nous intéresse (LW-D). C'est, en effet, le cas théoriquement le mieux justifié et c'est aussi le plus stable. Son principal problème est une dissipation trop forte due à une discrétisation de bas ordre aux bords et au terme ABC. On propose donc d'approximer les dérivées premières intervenant dans les équations de ρ_0^{n+1} et ρ_N^{n+1} avec plus de précision. On a alors :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_0^n = \frac{-u_2^n + 4u_1^n - 3u_0^n}{2h} \quad (6.56)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_N^n = \frac{u_{N-2} - 4u_{N-1} + 3u_N^n}{2h} \quad (6.57)$$

En réécrivant les termes (6.46) et (6.48), en considérant les relations (6.56) et (6.57), on peut construire la matrice d'amplification $[\mathbf{Q}]_2$ et calculer ses valeurs propres.

On réalise une comparaison entre les valeurs propres de la matrice $[\mathbf{Q}]_2 = [\mathbf{Q}]_c + [\mathbf{Q}]_{b,2}$ (ordre 2 en précision pour dérivées premières) et celles de la matrice $[\mathbf{Q}]_1 = [\mathbf{Q}]_c + [\mathbf{Q}]_{b,1}$ (ordre 1 pour les dérivées premières) définie en utilisant (6.17) et (6.55). Pour ce faire, on fixe le CFL à 0.07. On obtient les spectres de la figure 6.10.

Les valeurs propres de plus grand module strictement inférieur à 1 sont indiquées dans le tableau 6.5.1

Matrice	$[\mathbf{Q}]_1$	$[\mathbf{Q}]_2$
$ \lambda_m $	0.999945	0.9999992

TAB. 6.2 - Valeur propre de plus grand module strictement inférieur à 1 pour les deux types d'approximations des dérivées premières.

On peut, dès lors, tracer l'enveloppe théorique de la variation de pression au cours du temps, d'une manière similaire aux résultats présentés au paragraphe 6.4. La figure 6.12 montre différentes enveloppes pour les approximations précises à l'ordre 1 et 2. Comme on s'y attendait, l'approximation d'ordre 2 permettant un gain en précision au bord, les résultats obtenus avec celle-ci sont meilleurs (amortissement quasi-nul pour un CFL de 0.07) qu'avec une dérivée première à l'ordre 1. En revanche, le revers de la médaille concerne la stabilité de la méthode obtenue. La figure 6.11 indique, en effet, qu'au delà d'un CFL de 0.1, la méthode diverge (au moins une valeur propre de module plus grand que 1), alors qu'avec la dérivée au bord à l'ordre 1, la limite obtenue en CFL est 1. La correction ne présente donc qu'un faible intérêt, du fait de sa stabilité réduite.

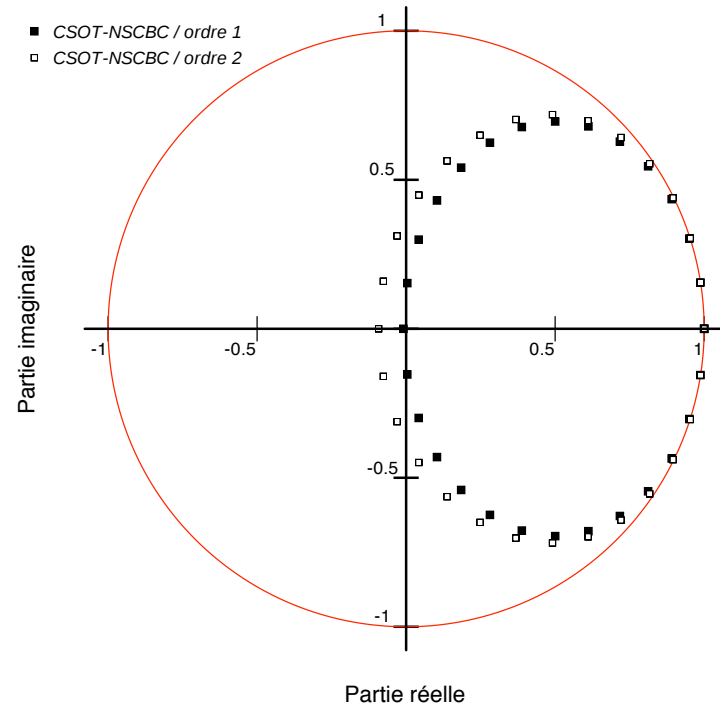


FIG. 6.10 - Valeurs propres de la matrice d'amplification pour deux approximations des dérivées premières différentes dans le cas LW-D. Carrés pleins : ordre 1 ; Carrés blancs : ordre 2

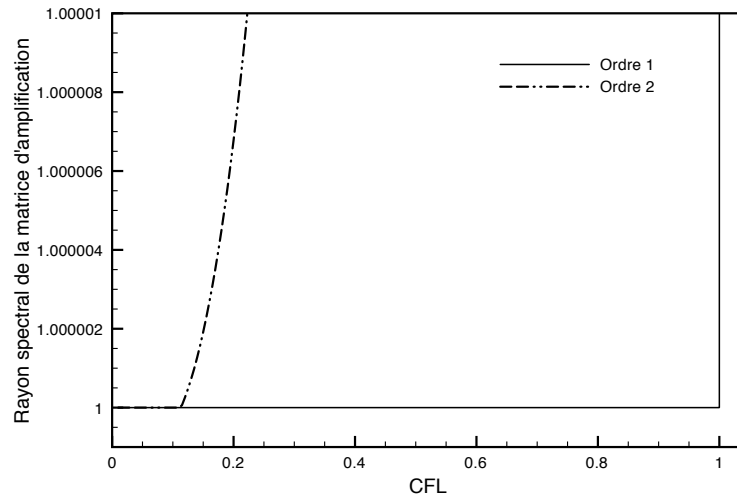


FIG. 6.11 - Domaines de stabilité des schémas LW avec une formulation CSOT et des conditions limites caractéristiques, avec différentes approximations pour les dérivées d'ordre 1 aux bords.

6.5.2 Intégration temporelle d'ordre 2 aux bords

L'instabilité du couple CSOT + Dirichlet a déjà été observée et rappelée par Thompson [243]. Un argument plausible pour expliquer la divergence des calculs à long terme vient de la différence

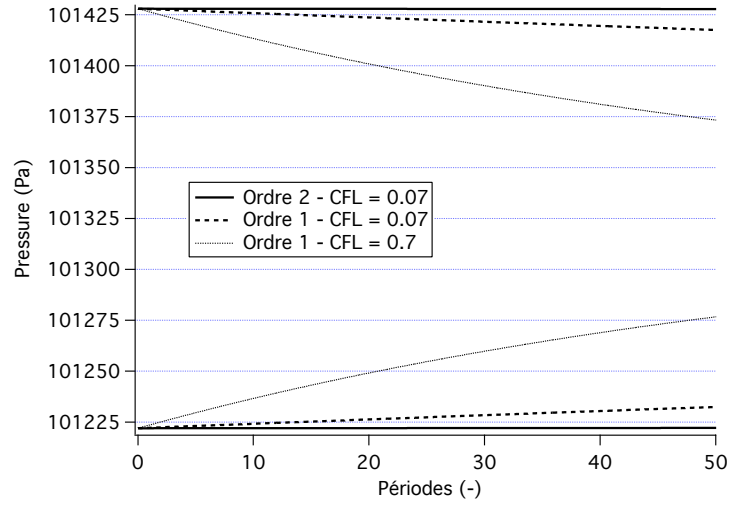


FIG. 6.12 - Enveloppe théorique temporelle de la variation de pression au point de mesure indiqué figure 6.1, pour différentes approximations aux bords.

d'intégration temporelle entre le centre du domaine de calcul, à l'ordre 2 et les bords, à l'ordre 1. En effet, on rappelle que la fermeture CSOT consiste à annuler tout le terme diffusif du schéma LW, dont l'origine est une dérivée temporelle d'ordre 2. Ainsi, supprimer ce terme diffusif revient à réduire l'intégration temporelle au schéma d'Euler, qui peut être instable avec certaines discrétisations spatiales. Du fait de la forte restriction du domaine de stabilité, lorsque les dérivées spatiales d'ordre 1 sont calculées avec plus de précision, l'intérêt de cette amélioration est limité. Assurer une dérivation temporelle d'ordre 2 aux bords permettrait, sans doute, un gain en stabilité. Pour ce faire, deux solutions sont envisageables mais n'ont pas été testées pendant cette thèse :

- Une intégration temporelle en 2 étapes aux bords (intégration de Heun par exemple [184])
- Plutôt que l'annuler pour les noeuds de bord, on peut décider de calculer la dérivée spatiale d'ordre 2 avec une approximation aux différences décentrées (ce qui implique d'élargir le stencil).

6.6 Conclusions

La méthode de la matrice est donc un outil très puissant permettant d'étudier la stabilité des méthodes numériques, à l'instar de la méthode de Von Neumann. Son gros avantage repose sur la possibilité de prendre en compte, à la fois, les discrétisations de bord et les conditions limites. Comme on l'a vu dans la section 6.4, cette méthode donne la possibilité d'étudier les schémas numériques d'AVBP (sous certaines conditions), avant de les implanter directement dans le code, ce qui peut constituer un gain de temps considérable.

Un exemple d'application a été abordé, section 6.5. La méthode de la matrice a permis de mettre en évidence un gain de précision sensible (un taux d'amortissement plus faible), lorsque les dérivées spatiales premières aux bords sont calculées sur 3 points plutôt que 2. Néanmoins, elle indique aussi que le domaine de stabilité est fortement réduit (et on peut craindre qu'en 2D ou en 3D, la réduction du domaine de stabilité soit encore plus importante), limitant ainsi l'intérêt de coder cette correction dans AVBP.

Enfin, on terminera en relativisant le problème mis en évidence sur le mode acoustique dans la cavité. La majorité des modes qui nous intéressent le plus, dans le cadre d'étude des instabilités de combustion, ont une fréquence souvent inférieure à 1000 Hz. Si on considère une vitesse du son de 800 m/s, alors on obtient une longueur d'onde de 0.8 m. En imaginant que la taille de maille moyenne dans la chambre est inférieure au centimètre (en réalité, les mailles sont bien plus petites !), on a donc plus de 80 points pour résoudre le mode, c'est-à-dire bien plus que dans l'exemple étudié ici ! En revanche, dans un cas d'aéro-acoustique, cette remarque serait certainement plus nuancée. Une conclusion plus générale est donc que le choix du schéma TTGC (ou LW) et de la formulation CSOT aux bords, combinée avec des conditions limites NSCBC, reste un excellent compromis pour les LES en combustion. C'est donc ce qui sera utilisé dans le chapitre suivant.

Chapitre 7

Application au foyer MERCATO (chambre de combustion académique)

7.1 Introduction - Contexte

Afin d'étudier l'allumage d'un brouillard diphasique dans les foyers aéronautiques, une chambre de combustion expérimentale est montée sur le banc MERCATO (par la suite et pour la simplicité, on désignera la chambre par "MERCATO") au centre du Fauga-Mauzac de l'ONERA, près de Toulouse. D'un point de vue physique, le but est d'améliorer la connaissance et la compréhension des différentes phases de l'allumage : de la propagation du noyau à la stabilisation de la flamme. Pour ce faire, Turbomeca a financé entre novembre 2004 et novembre 2007 deux thèses (CIFRE) : la première, menée par Nicolás García Rosa, se faisant à l'ONERA, pour réaliser les manipulations expérimentales sur la chambre mentionnée et l'autre (il s'agit de cette thèse) au CERFACS pour mener à bien les LES. Les objectifs, autour de ces études, sont multiples. Le travail expérimental a pour but de comprendre les phénomènes physiques pour différentes conditions de fonctionnement (pression et température très variables), déterminer les zones d'allumage privilégiées (c'est-à-dire où placer la bougie d'allumage, pour assurer la plus grande probabilité d'obtenir une flamme stabilisée) et enfin permettre la validation des calculs numériques (stationnaires et instationnaires).

Même si la simulation numérique de la combustion turbulente a fait de réels progrès ces dernières années, notamment grâce à la LES [172, 116, 216], la résolution de la phase liquide reste une difficulté majeure. Certaines LES ont été réalisées en utilisant une méthode Lagrangienne pour le liquide [36, 92, 142], mais l'interaction flamme / liquide est encore assez mal maîtrisée. Le choix du CERFACS s'est porté sur une représentation Eulérienne de la phase dispersée comme on l'a vu précédemment. Des LES diphasiques, utilisant cette formulation, ont été réalisées par le passé [154, 171, 192, 22]. Néanmoins, les géométries étudiées jusqu'alors sont, soit très académiques [154, 192] (pas de vrilles, par exemple), soit dans un contexte industriel (pas de validation expérimentale et suppression de certaines parties géométriques, notamment les tourbillonneurs et les atomiseurs). La chambre MERCATO ajoute donc un degré de complexité dans la simulation, en prenant compte des composants en amont de l'injection.

Ce chapitre présente les résultats obtenus lors des LES des différentes configurations de la chambre

MERCATO. On y décrit les résultats de la LES monophasique sans combustion, puis avec combustion de gouttes (JP10). La comparaison avec le banc MERCATO se fait sur les champs de vitesse pour des cas stabilisés. Les séquences d'allumage n'ont pas été étudiées pendant cette thèse et sont en cours au CERFACS actuellement.

7.2 Configurations

7.2.1 Configuration de base

La configuration de base est constituée des composants suivants :

- **Un tube souple** permet d'alimenter la configuration avec de l'air, dont la température est contrôlée en amont. L'air peut être refroidi pour reproduire des conditions de haute altitude ou chauffé.
- L'air venant du flexible débouche dans une **chambre de tranquillisation** ou **plénum** à section carrée de 100 mm de côté et de 200 mm de long.
- Dans le plénum se trouve **l'injecteur**, tenu par des brides et dont la longueur et la largeur maximum sont d'environ 90 mm, obturant ainsi une grande partie de la section de passage de la boîte (voir figure 7.1). L'air sort du plénum en passant par les 12 vannes du **tourbillonneur** ou **swirler** qui imposent au fluide un très fort mouvement de rotation. Il passe ensuite par le **diffuseur** qu'on décrira un peu plus loin.
- L'air débite ensuite avec un fort mouvement de *swirl* dans **la chambre** de section carrée de 130 mm de côté et dont la longueur est de 285 mm. La chambre possède des parois transparentes (en quartz) sur le côté, afin de pouvoir réaliser des mesures expérimentales à l'aide de lasers (LDA, PDPA ou PIV) ou des films avec une caméra rapide.

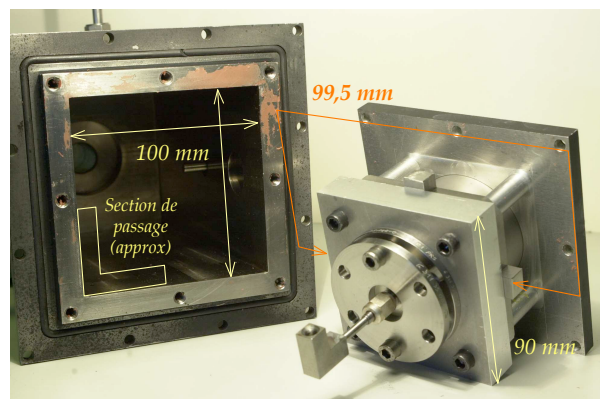


FIG. 7.1 - Photo du plénum et du tourbillonneur. Celui-ci est fixé à une paroi du plénum grâce à un jeu de brides et obstrue une grande partie de la section de passage de l'écoulement. Photo de N. García Rosa

La figure 7.2 présente les détails géométriques inclus dans le calcul. A l'exception du petit tube d'amenée du fuel et de certaines vis situées dans le plénum qui ont été supprimées, afin d'éviter d'avoir de trop petites mailles dans une zone ayant un intérêt limité, tous les détails ont été gardés. Le plénum a été conservé, en particulier, à cause de sa grande influence acoustique sur le reste de l'écoulement [116]. On se souvient, en effet, de certaines simulations réalisées dans des chambres sans plénum [216], ne présentant pas certaines instabilités acoustiques longitudinales, détectées expérimentalement et, par la

suite, dans un calcul thermo-acoustique. L'inconvénient majeur est que l'atomiseur se retrouve dans le domaine de calcul (voir la présentation des résultats de la simulation diphasique).

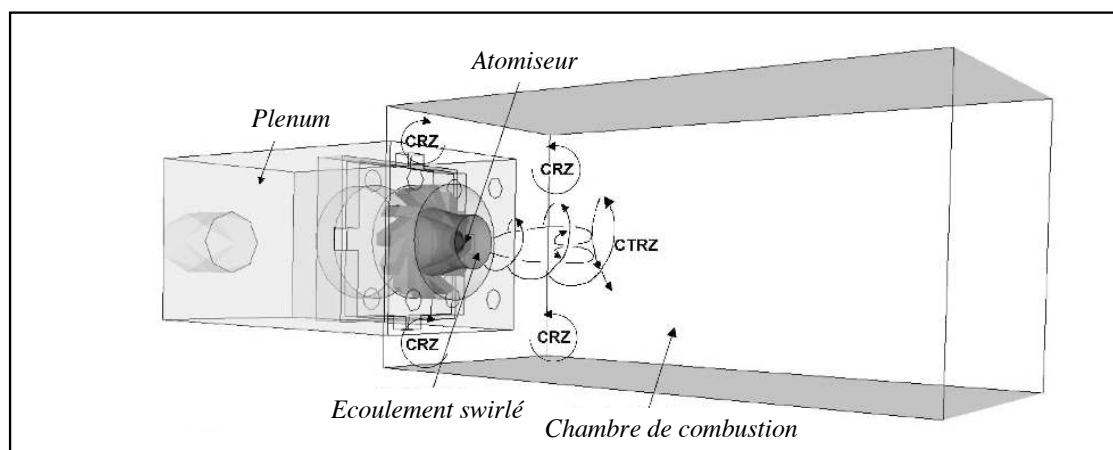


FIG. 7.2 - Géométrie de la configuration de base du banc MERCATO. Les trois parties principales apparaissent : plénum - tourbillonneur - chambre. On indique en outre les grandes zones de recirculation qui apparaissent dans l'écoulement (section 7.3). Image tirée du rapport de stage de Master de M.Sanjósé [207].

7.2.2 Injecteur

Pendant cette thèse, l'injecteur utilisé dans l'expérience a changé. Celui-ci a été fourni à l'ONERA par Turbomeca. A l'origine, le diffuseur était très évasé et provoquait un éclatement très prononcé du jet, qui était ainsi plaqué contre le fond de chambre tant le *swirl* était fort. Cet effet est souvent recherché car il permet une stabilisation efficace de la flamme. Néanmoins, cette configuration du jet posait plusieurs problèmes, numériques et expérimentaux, dont certains rédhibitoires :

- La zone de recirculation centrale obtenue était extrêmement grande ce qui ralentissait considérablement la convergence des simulations numériques.
- Une grande quantité de gouttes, à cause de la forte traînée induite par le jet éclaté, avait tendance à impacter les parois, créer des films liquides et empêcher toute mesure expérimentale (en quelques secondes, les films se formaient, empêchant l'utilisation du laser). Par ailleurs, ce type de calculs reste problématique, compte tenu de l'état de l'art, en matière de simulation des films liquides dans une LES.

Pour toutes ces raisons, le diffuseur de l'injecteur a été modifié par l'ONERA, afin de confiner le jet d'air et ainsi éviter une centrifugation trop rapide des gouttes les plus légères. La figure 7.3 présente un schéma de la modification qu'a réalisé l'atelier de l'ONERA et la figure 7.4 une comparaison entre les deux géométries. Cette deuxième géométrie a été utilisée pour produire les résultats expérimentaux et numériques présentés dans la suite de ce chapitre.

7.2.3 Aval de la chambre

Là aussi, deux cas ont été considérés, suivant le confinement de la sortie des gaz.

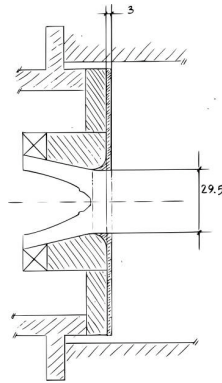


FIG. 7.3 - Plan de la modification apportée à l'injecteur d'origine. Schéma fourni par N.García Rosa

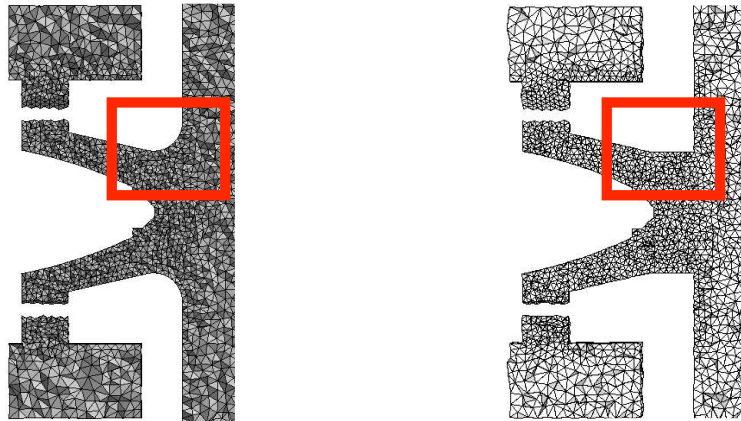


FIG. 7.4 - Comparaison entre les deux géométries. Les rectangles en trait gras indique la zone du diffuseur qui a été changée.

Configuration A - Non confinement

La première, qu'on appellera *configuration A*, correspond au non confinement du jet en sortie de la chambre : celui-ci débouche, en effet, directement dans l'atmosphère. La configuration A a pour rôle de décrire les écoulements monophasique et diphasique, valider les outils de mesures expérimentales ainsi que les simulations numériques. Ce cas servira de cas de référence.

La phase gazeuse est caractérisée par des mesures de vitesses à l'aide de vélocimétrie laser Doppler (LDA - *Laser Doppler Anemometry*). L'ensemencement est effectué avec de très fines gouttes (très faible nombre de Stokes) injectées en amont. La phase liquide utilise un système de mesure similaire mais l'injection de carburant se fait, évidemment, avec l'atomiseur. Dans la simulation numérique, afin de reproduire au mieux le non confinement de l'air en sortie de chambre, on a choisi de connecter la sortie de la chambre à un grand volume cubique, comme le montre la figure 7.5. Afin de reproduire au mieux les conditions réelles, un léger co-courant est imposé dans ce volume représentant l'environnement expérimental.

La raison principale de la présence de ce volume est d'éloigner au maximum la condition limite de

sortie. Tout d'abord, la zone de recirculation centrale, bien que plus petite que dans le cas du diffuseur évasé décrit précédemment, reste très longue. En effet, celle-ci sort de la chambre de combustion (effet d'aspiration ressenti lors des mesures expérimentales). Or on sait, d'un point de vue pratique, qu'une condition de sortie avec décomposition classique en ondes caractéristiques (avec pression imposée) [176], comme on en utilise dans un calcul AVBP, devient instable en présence de vitesses négatives. Par conséquent, arrêter le calcul à la fin de la chambre aurait été dangereux.

De plus, une condition limite de sortie ne peut pas être parfaitement non réfléchissante, au risque de voir la pression moyenne dévier de la valeur cible que veut imposer l'utilisateur. De ce fait, avoir la condition limite en sortie de chambre risquerait aussi de modifier le comportement acoustique global de la configuration.

Il faut préciser, ici, que malgré les efforts pour pincer le jet en sortie de l'injecteur (en modifiant le diffuseur), les gouttes de carburant continuent à former des films qui finissent par empêcher toute mesure expérimentale. La solution pour régler ce problème est donc de chauffer l'air au préalable, à environ 180°C, afin de provoquer l'évaporation du spray avant que celui-ci n'impacte la paroi. Ainsi, jusqu'à environ 60 mm du fond de chambre, les parois restent transparentes et les mesures par anémométrie laser sont possibles.

Configuration B - confinement

Cette deuxième configuration est utilisée pour réaliser les essais d'allumage pour différentes conditions extérieures. L'objectif à terme du projet est d'étudier l'allumage à des températures et pressions très défavorables, reproduisant la haute altitude. Afin d'obtenir expérimentalement les 0,5 bar et -50°C préconisés par Turbomeca, un dispositif spécial doit être mis en place. L'air est refroidi, avant d'entrer dans le plénum, pour atteindre les basses températures souhaitées. La faible pression est obtenue grâce à un système d'aspiration (figure 7.5) connecté en aval de la chambre de combustion. Il est constitué d'une boîte parallélépipédique, appelée **manchette**, de même section que la chambre et de 220 mm de longueur. Un tube de section circulaire ou **trompe aspirante** part du milieu de la face inférieure de la manchette. Son diamètre est de 122 mm. Au bout de la trompe se trouve un convergent. La dépression est obtenue par effet Venturi en faisant circuler un écoulement d'air au niveau du col du convergent. Le domaine de calcul est représenté par la figure 7.5.

Deux points de fonctionnement intéressent Turbomeca. Dans les deux cas, il n'y a pas d'évaporation avant allumage de la chambre, ce qui signifie qu'aucune mesure à froid n'est disponible, à cause de la formation de films sur les parois. En revanche, pendant les essais d'allumage, des champs de vitesse moyenne ont été obtenus par l'ONERA pour des régimes stabilisés. Les mesures sont effectuées avec un système de vélocimétrie par images de particules (PIV pour *Particle Image Velocimetry*). Les particules utilisées pour l'ensemencement sont alors les gouttes de fuel. Les plans laser sont soit longitudinaux (dans le sens vertical), soit transversaux.

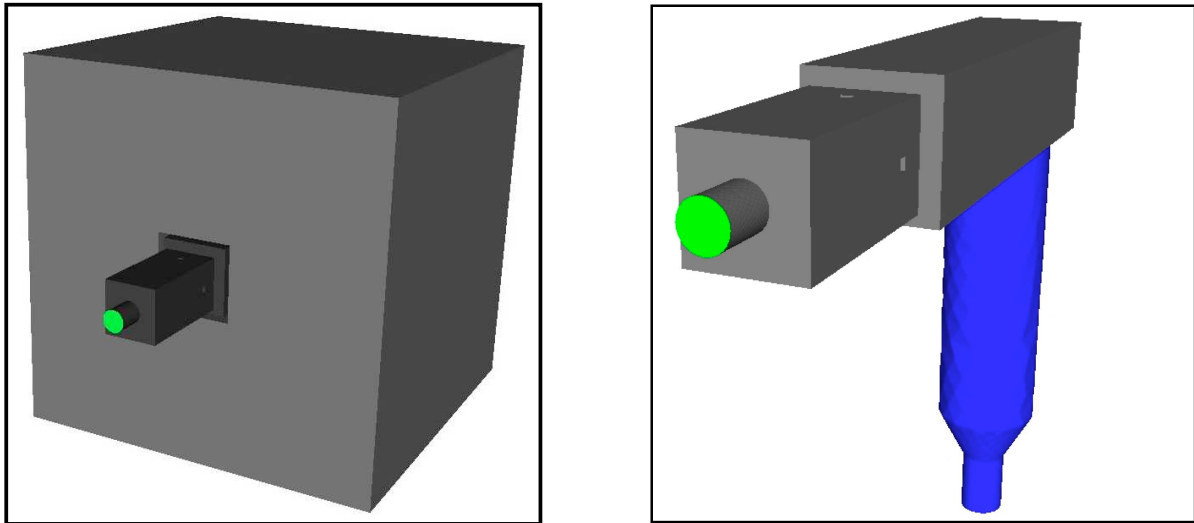


FIG. 7.5 - Les deux configurations MERCATO. A gauche : configuration A. La chambre débouche dans l'atmosphère représentée par un grand volume cubique. A droite : configuration B. Un système d'aspiration est branché en aval de la chambre. Il est constitué d'un volume de section carrée similaire à la chambre (manchette) puis d'un tube rigide d'aspiration connecté à la face inférieure de la manchette, terminé par un convergent.

7.3 Géométrie A - écoulement monophasique

On rappelle que le point de fonctionnement étudié ici n'était pas prévu initialement. Néanmoins, à cause des difficultés causées par la formation des films liquides sur les parois, la solution consistant à chauffer l'air en amont du plénum a été adoptée par l'ONERA. Ce point de fonctionnement est, de ce fait, le plus riche, d'un point de vue données expérimentales et c'est pourquoi il est étudié ici. On présente dans cette section, les résultats obtenus pour le calcul monophasique dans la configuration A. Le but de cette étude est de valider la simulation aux grandes échelles dans cette configuration, avant d'étudier la phase liquide. En outre, elle permettra de réaliser une comparaison qualitative et quantitative des méthodes numériques employées.

7.3.1 Caractéristiques du maillage et point de fonctionnement

Maillage

Le maillage employé pour réaliser la simulation de l'écoulement monophasique est présenté figures 7.6 et 7.7 et ses caractéristiques sont résumées dans le tableau 7.1. Le plénum est peu raffiné, car seules les plus grandes échelles (surtout acoustiques) nous intéressent (*a priori*). Toutefois, le maillage doit être suffisamment fin (préciser une taille de maille) pour permettre à l'écoulement de se déstabiliser dans cette chambre de tranquillisation et générer de la turbulence, avant que l'air ne rentre dans le tourbillonneur. Ce dernier est maillé de manière beaucoup plus fine, afin de pouvoir capter les grandes structures turbulentes. Le sillage des pales du tourbillonneur est, en effet, le siège de nombreuses instabilités (voir chapitre 10 de [129]). La chambre et, en particulier, la sortie de l'injecteur sont aussi maillées très finement, car il s'agit de la zone d'intérêt de ce calcul. En revanche, on notera que le maillage de l'atmosphère est très lâche et cela pour plusieurs raisons. La première est la réduction du

temps de calcul (ou plutôt éviter que celui-ci n'augmente considérablement à cause de la présence de l'atmosphère). La seconde raison va de pair avec les explications données section 7.2 : les conditions limites sont repoussées loin de la sortie de la chambre grâce à la présence de l'atmosphère afin d'éviter la divergence du calcul en cas de présence d'une zone de recirculation ou du passage d'un tourbillon. Avoir un maillage grossier permet de détruire toute structure turbulente qui sortira de la chambre (les quantités de viscosité numérique, turbulente ou artificielle sont proportionnelles à des puissances strictement positives de la taille caractéristiques de la maille). Il s'agit donc d'une sécurité pour assurer le bon fonctionnement de la condition limite de sortie.

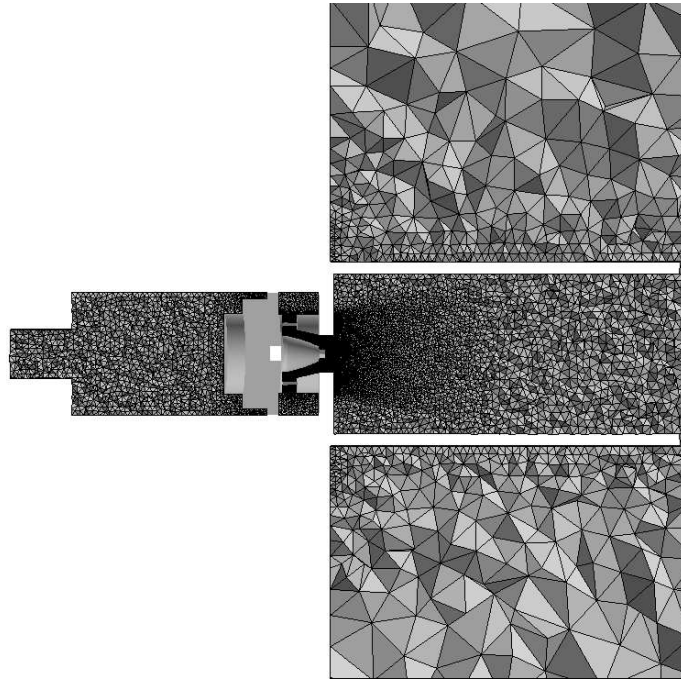


FIG. 7.6 - Maillage de la configuration A : coupe longitudinale. On montre la zone la plus raffinée, c'est-à-dire proche injecteur.

Conditions limites et initiale

La figure 7.8 résume les principales conditions limites utilisées dans cette thèse¹ et les valeurs cibles. Il y a deux entrées et une sortie, le reste est constitué de murs adiabatiques glissants ou avec lois de parois. L'entrée d'air est gérée grâce à une condition limite d'entrée de type NSCBC avec débit imposé (au lieu de la formulation classique où la vitesse est imposée) [220]. La deuxième entrée correspond à une entrée de type NSCBC avec vitesse imposée. Elle permet d'imposer un léger co-courant, supposé reproduire l'effet d'entraînement de l'air ambiant, dû au courant sortant de la chambre. Enfin à la sortie, on choisit une condition limite, là encore de type NSCBC, avec pression imposée. Des conditions limites avec lois de parois sont utilisées pour les murs du plénum, de l'injecteur et de la chambre. Enfin, il faut préciser que les murs extérieurs de la chambre sont glissants. La condition initiale est l'air chauffé à $463K$ au repos.

¹Le pas de temps n'est pas constant pendant le calcul, le Δt fourni est juste une indication d'ordre de grandeur.

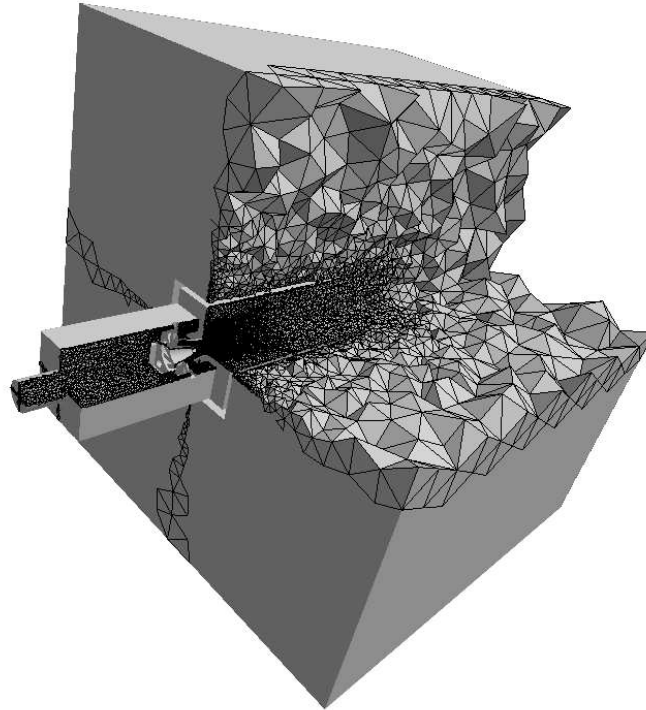


FIG. 7.7 - Maillage de la configuration A : vue complète. L'atmosphère est beaucoup moins raffinée que le reste de la configuration.

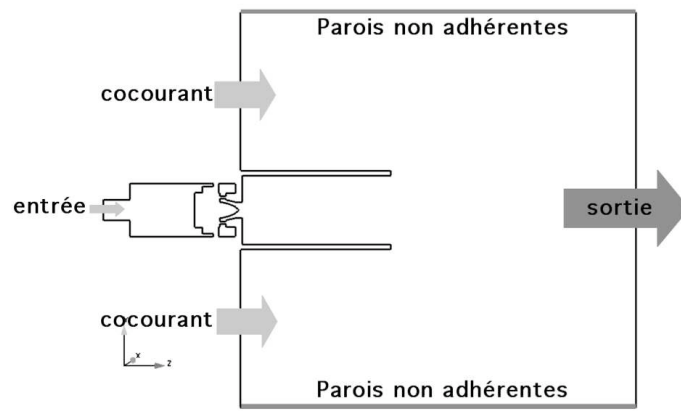


FIG. 7.8 - Coupe longitudinale de la configuration A et conditions limites.

Paramètres numériques et temps de calcul

On résume dans le tableau 7.2 les paramètres numériques utilisés pour obtenir les résultats présentés par la suite. Le schéma choisi pour présenter les résultats dans cette thèse est le schéma Lax-Wendroff *cell-vertex*, associé à l'opérateur de viscosité de Colin [44]. La grande majorité des noeuds de frontière étant des parois (conditions limites non caractéristiques), on choisit une fermeture de type USOT ($\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}^n) = 0$ - voir section 4.12). Le modèle de sous-maille utilisé est celui de Smagorinsky avec une constante C_S fixée à 0.18. Les deux opérateurs de diffusion ont été testés sans faire apparaître de différence sensible. Les résultats présentés sont obtenus avec l'opérateur dérivé de la méthode de

Paramètres	Choix / Valeurs
Noeuds N_h	255785
Cellules N_K	1351081
Volume minimal (m^3)	5.10^{-10}
Pas de temps (s)	5.10^{-7}
Entrée du plénum	Entrée Caractéristique à débit imposé (approche temporelle) $\dot{m} = 15 \text{ g/s}$ $T = 463K$ <i>mélange : air (N_2/O_2)</i>
Entrée du cocourant	Entrée Caractéristique avec vitesse imposée (approche temporelle) $u_z = 0.5 \text{ m/s}$ $T = 463K$ <i>mélange : air (N_2/O_2)</i>
Sortie	Sortie NSCBC avec pression imposée (approche spatiale) $p = 101300Pa$
Parois	Murs adiabatiques avec lois de parois
Limites de l'atmosphère	Murs adiabatiques glissants

TAB. 7.1 - Paramètres principaux du calcul monophasique sur la configuration A

Galerkin (2Δ). Enfin, on indique un exemple d'ordre de grandeur de temps de calcul sur un IBM JS21 (alias "Egée" au CERFACS) dans le tableau 7.3.

Paramètres	Choix / Valeurs
Schéma de convection	Lax-Wendroff <i>cell-vertex</i> (sec. 4.4) (CFL) : $\nu = 0.7$
Schéma de diffusion	Opérateur 2Δ (sec. 4.8)
Modèle de sous-maille	Smagorinsky (sec. 2.2.3) $C_S = 0.18$
Modèle de viscosité artificielle	Modèle de Colin (sec. 4.11) $\epsilon^{(2)} = 0.01$ $\epsilon^{(4)} = 0.05$

TAB. 7.2 - Paramètres numériques du calcul monophasique sur la configuration A

Nombre d'itérations	Temps physique (ms)	Nombre de processeurs	Temps CPU (h)
50 000	~ 25	32	~ 5
1 000 000	~ 500	32	~ 100

TAB. 7.3 - Temps caractéristiques de calcul pour la simulation monophasique de la configuration A.

7.3.2 Structure de l'écoulement

Rappel sur les jets *swirlés*

L'écoulement au sein de la chambre MERCATO est *swirlé*. Cet anglicisme est utilisé pour caractériser les écoulements dans lesquels le fluide, en plus de son impulsion axiale, possède un mouvement de

rotation par rapport à la direction axiale. Ce type d'écoulement est très employé dans les turbines à gaz car il permet de stabiliser les flammes, sans avoir recours à un élément intrusif dans l'écoulement. En effet, l'une des caractéristiques principales des jets swirlés est de créer des zones de recirculation, en particulier au centre de la chambre. Ces zones capturent les gaz brûlés et impliquent des vitesses faibles où la flamme peut "s'accrocher". Le nombre adimensionnel permettant de caractériser ces écoulements est le nombre de swirl, qu'on note S . Il compare le flux axial de moment cinétique au flux axial de quantité de mouvement axiale. Celui-ci est défini (en négligeant grandeurs turbulentes et gradients de pression) dans une conduite de rayon R [240] :

$$S = \frac{\int_0^R \rho \bar{u}_z \bar{u}_\theta r^2 dr}{R \int_0^R \rho \bar{u}_z^2 r^2 dr} \quad (7.1)$$

où $\bar{u}_z$ est la vitesse axiale moyenne et $\bar{u}_\theta$ est la vitesse tangentielle moyenne. Il existe deux catégories d'écoulements [240] (figure 7.3.2) :

- $S \leq S_c$: lorsque le jet swirlé débouche dans un volume moins confiné, l'angle du jet, l'entraînement et la décroissance de la vitesse axiale sont plus importants que pour un jet sans mouvement de rotation. Aucune zone de recirculation n'apparaît néanmoins.
- $S \geq S_c$: Le gradient de pression axial causé par le gradient de pression radial devient suffisamment fort pour inverser localement la vitesse axiale et créer ainsi une ou plusieurs zones de recirculation. S_c est le nombre de swirl critique. La littérature donne une valeur autour de 0.6-0.7 [240]. Les écoulements possédant un nombre de swirl supérieur à la valeur critique ont une topologie bien particulière, à cause du phénomène de *vortex breakdown*. Il apparaît un point de stagnation dans l'écoulement, suivi d'une zone de vitesses négatives et d'une brusque expansion du jet [124, 80]. Lorsque le jet swirlé débouche dans un espace moins confiné, une zone de recirculation centrale toroïdale (CTRZ pour *central toroidal recirculation zone*) apparaît au centre de l'écoulement et d'autres dans les coins (CRZ pour *corner recirculation zone*), sauf si l'expansion n'est pas brusque [38]. Si le nombre de swirl est suffisamment élevé et la géométrie le permet (les conditions sont encore assez mal comprises), le jet peut être très éclaté, collé au fond de chambre et la zone de recirculation centrale s'étend radialement dans tout le volume.

Une autre spécificité des écoulements à $S \geq S_c$ est le caractère très instationnaire de ceux-ci. En général, il apparaît une instabilité appelée PVC (pour *precessing vortex core*). Il s'agit d'une structure tourbillonnaire ayant un mouvement de précession autour de l'axe central et s'enroulant autour de la zone de recirculation centrale [240].

Grandeurs caractéristiques

Avant de présenter les résultats, on rassemble, tout d'abord, quelques valeurs caractéristiques de l'écoulement :

- Le temps caractéristique de convection est déterminé en calculant le rapport entre la masse totale présente dans la configuration et le débit d'air injecté en entrée $\dot{m}_{tot}$. Dans l'évaluation de la masse totale m_{tot} , on ne comptabilise pas l'atmosphère.

$$\tau_{conv} = \frac{m_{tot}}{\dot{m}} = \frac{4.988}{15} = 0.33 \text{ s} \quad (7.2)$$

- Le Nombre de Reynolds au plan de sortie de l'injecteur est égal à :

$$Re = \frac{u_{deb} d_{inj}}{\nu} \simeq \frac{29.5 \times 29.10^{-3}}{3.10^{-5}} \simeq 28500 \quad (7.3)$$

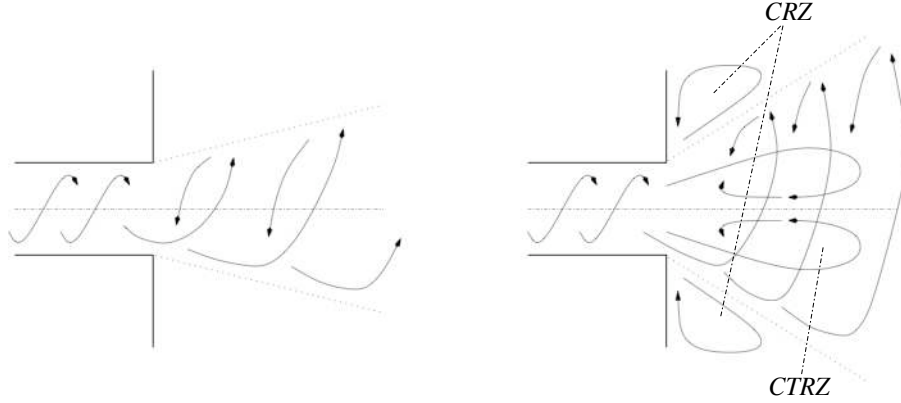


FIG. 7.9 - Illustrations de l'effet du swirl. A gauche : pour $S \leq 0.4$, l'expansion du jet est plus importante que dans un cas non-swirlé. A droite : pour $S > 0.6$, angle d'ouverture important et apparition d'une zone de recirculation centrale.

u_{deb} est la vitesse débitante et d_{inj} est le diamètre de l'injecteur.

Ecoulement moyen

Analyse qualitative Le nombre de swirl dans la configuration a été calculé à 2 mm en amont du fond de chambre. Celui-ci est égal à **0.82** donc supérieur au seuil critique. Les figures 7.10-7.12 présentent les champs des composantes de vitesse moyenne dans la chambre de MERCATO. La moyenne temporelle d'une grandeur $\phi(\vec{x}, t)$ est calculée, en pratique, comme suit :

$$\langle \phi(\vec{x}, t) \rangle = \frac{1}{T_m} \sum_{n=1}^{N_T} \phi(\vec{x}, t^n) \Delta t_m \quad (7.4)$$

où T_m correspond à la durée sur laquelle est réalisée la moyenne, N_T le nombre total de champs instantanés et Δt_m la durée séparant les champs instantanés consécutifs, utilisés pour le calcul. Ici $T_m = 0.5$ s. On retrouve les caractéristiques classiques observées dans ce type d'écoulement. Par conservation du débit, le jet est très fortement accéléré dans les vrilles, puis dans le diffuseur de l'injecteur. La composante tangentielle, figure 7.12 rappelle que l'écoulement est très fortement swirlé.

Le jet débouche ensuite dans la chambre où il s'ouvre en deux fois, comme on peut le voir sur la figure 7.11. En effet, l'éclatement dû au swirl est limité, dans un premier temps, par le diffuseur droit qui confine le jet ². Sur la composante axiale, figure 7.10, ainsi que sur les lignes de courant, figure 7.13, on peut observer ce phénomène. La zone de recirculation centrale a la forme d'un goulot de bouteille (dans la littérature, on parle de *bottle-neck* [38]) et présente deux cellules toroïdales.

On note, par ailleurs, la présence des zones de recirculation dans les coins (pour $z < 60$ mm) sur les figures 7.10 et 7.14, qu'on ne voit plus sur la figure 7.15, à $z = 116$ mm. Loin des parois, l'écoulement est axisymétrique (le jet est circulaire quand il débouche dans la chambre). Néanmoins, l'axisymétrie est rompue, la chambre étant carrée et ayant, de ce fait, des directions privilégiées. A la sortie de l'injecteur,

²On rappelle qu'un calcul similaire avait été réalisé en début de thèse avec un diffuseur évasé. Le jet était alors plaqué contre le fond de chambre.

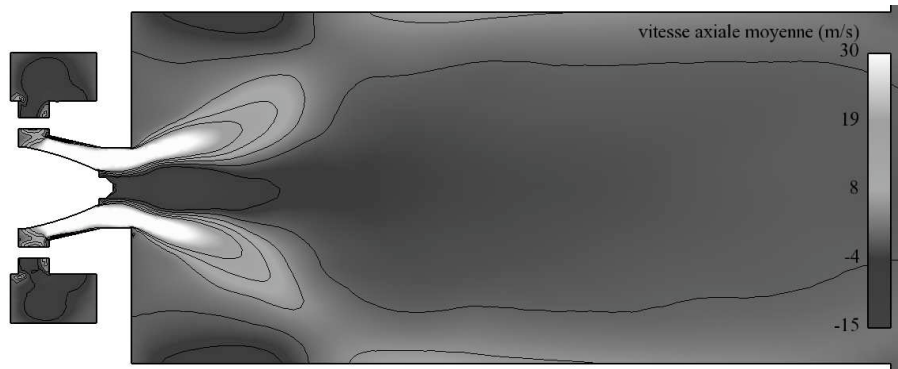


FIG. 7.10 - Champ de vitesse moyenne axiale. Coupe longitudinale en $x = 0\text{ mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\langle u_z \rangle$ dont les valeurs sont comprises entre -15 et 15 m/s.

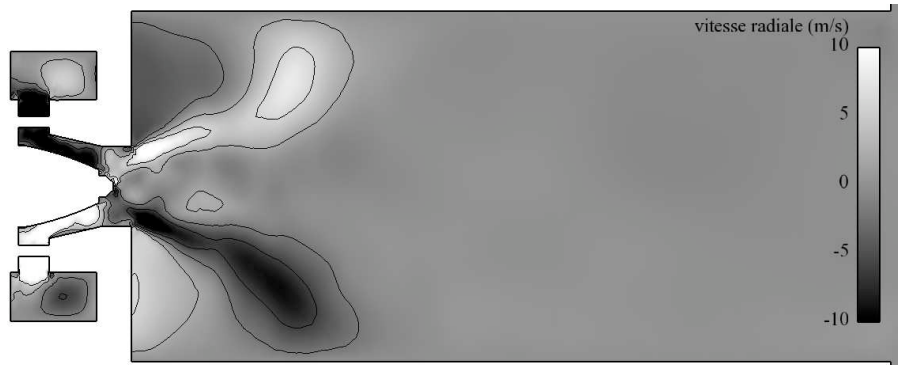


FIG. 7.11 - Champ de vitesse moyenne radiale. Coupe longitudinale en $x=0\text{ mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\langle u_r \rangle$ dont les valeurs sont comprises entre -6 et 6 m/s.

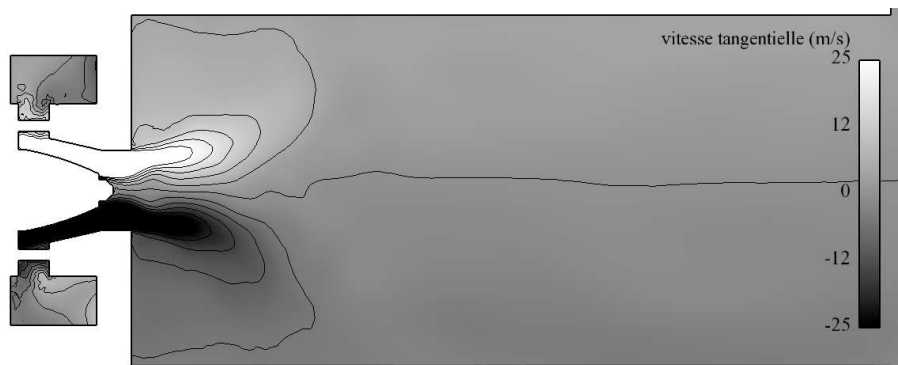


FIG. 7.12 - Champ de vitesse moyenne tangentielle. Coupe longitudinale en $x = 0\text{ mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\langle u_\theta \rangle$ dont les valeurs sont comprises entre -25 et 25 m/s.

le cisaillement est très important car le jet très rapide se trouve compris entre la zone centrale et les zones de coins. On verra que ces endroits sont propices à l'apparition de fortes instabilités hydrodynamiques. Environ 60mm en aval du fond de chambre, le jet impacte les parois et la majeure partie du débit contourne la zone de recirculation centrale (figure 7.13).

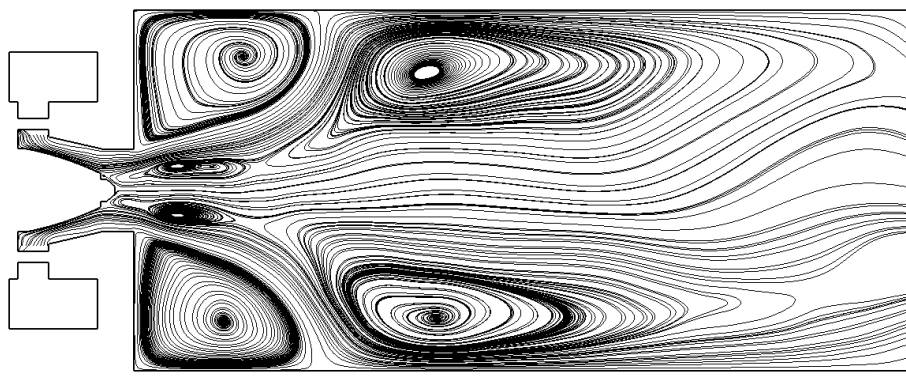


FIG. 7.13 - Lignes de courant construites avec la vitesse moyenne projetée sur le plan $x=0\text{mm}$.

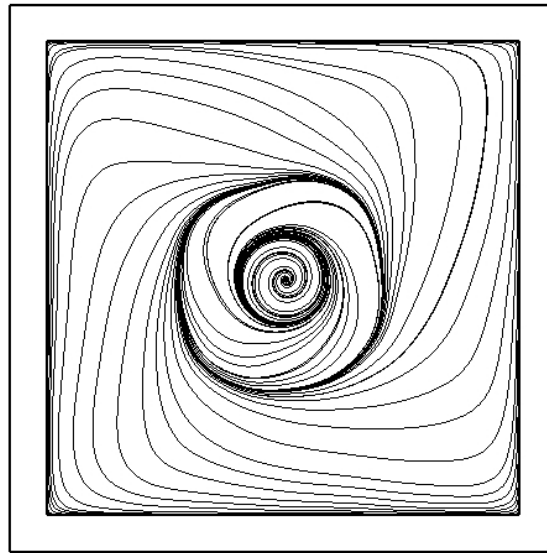


FIG. 7.14 - Lignes de courant construites avec la vitesse moyenne projetée sur le plan $z=26\text{mm}$. De l'extérieur vers le centre de la coupe, on voit la zone de recirculation de coin, le jet et enfin au milieu la CTRZ.

Analyse quantitative On va présenter une comparaison quantitative des résultats obtenus avec les données expérimentales, fournies par Nicolás García Rosa à l'ONERA. La figure 7.16 présente les abscisses auxquelles sont comparés les profils des trois composantes de la vitesse moyenne. Les tracés des profils sont donnés sur les figures 7.17, 7.18 et 7.19, ainsi que des indications pour représenter les zones de recirculation et le jet. Ces profils confirment les observations qualitatives, comme la présence d'une CTRZ en forme de bouteille et des CRZ (figure 7.3.2). Par ailleurs, les courbes sont symétriques par rapport à l'axe principal, dans la zone proche de l'injecteur, ce qui n'est plus vrai en aval.

Les résultats obtenus sont très satisfaisants, la concordance entre calculs et expériences étant bonne pour toutes les composantes de la vitesse moyenne, en particulier pour la vitesse axiale et ce, à toutes les abscisses de comparaison. La position des zones de recirculation, ainsi que l'ouverture du jet, sont très bien prédites. Les niveaux de vitesse, en particulier dans la zone proche injecteur, sont bien retrouvés dans la simulation, excepté une petite surestimation de la zone de vitesse négative, au centre de la CTRZ, sur le premier profil. Ces données permettent *a posteriori* de valider la méthode employée pour résoudre

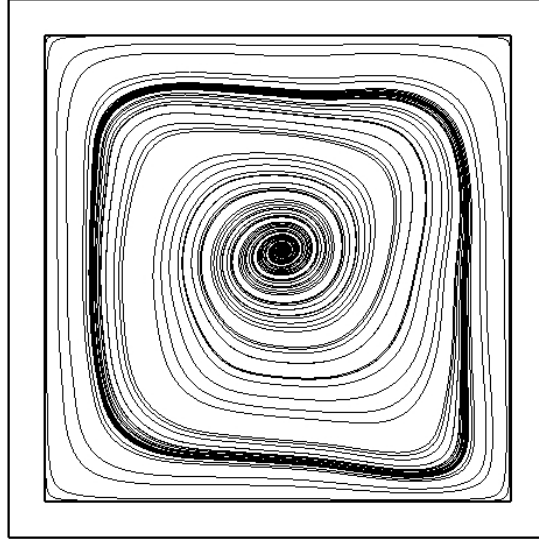


FIG. 7.15 - Lignes de courant construites avec la vitesse moyenne projetée sur le plan $z=116\text{mm}$. Le jet passe à la périphérie de la CTRZ.

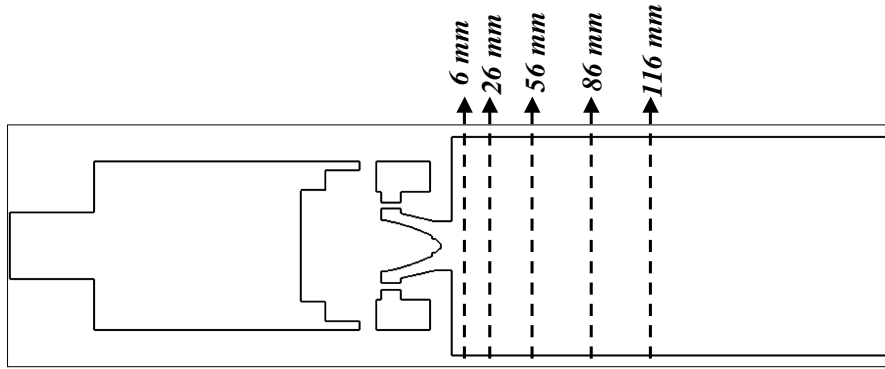


FIG. 7.16 - Position des profils de vitesse dans la coupe longitudinale.

l'écoulement dans la chambre MERCATO (au moins pour la résolution des vitesses).

Partie fluctuante et champs instantanés

Analyse qualitative des grandeurs fluctuantes Le type d'écoulement étudié ici est particulièrement instationnaire. Par endroits, les grandeurs fluctuantes peuvent atteindre jusqu'à 50% des grandeurs moyennes. Les valeurs RMS sont calculées de la manière suivante pour une grandeur $\phi(\vec{x}, t)$:

$$\phi^{RMS}(\vec{x}, t) = \sqrt{\langle \phi(\vec{x}, t)^2 \rangle - \langle \phi(\vec{x}, t) \rangle^2} \quad (7.5)$$

La figure 7.20 montre que les fluctuations de vitesse sont maximales dans la zone située près de l'injecteur. La forme tronconique de cette région, située autour de la CTRZ, trahit la présence du PVC.

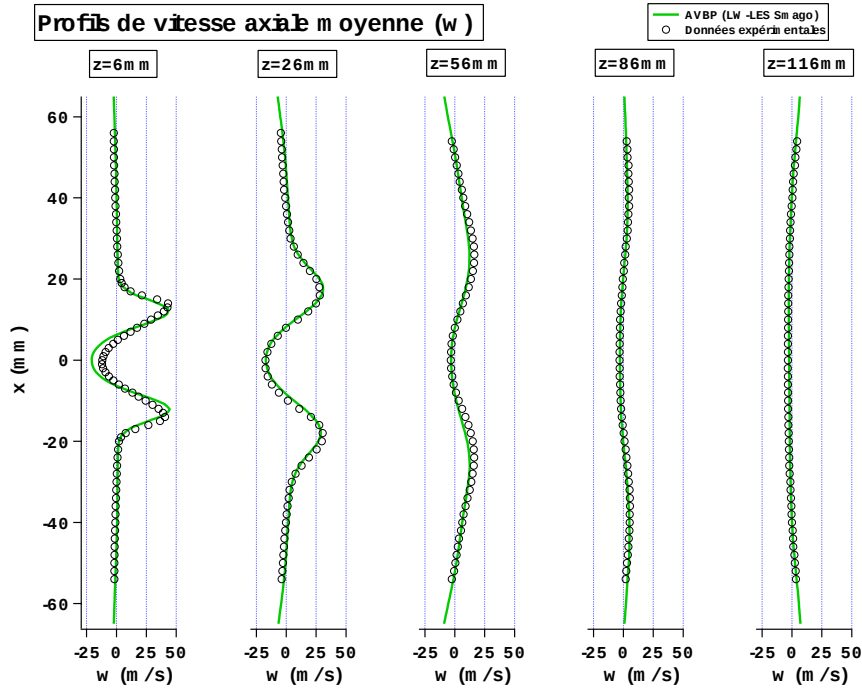


FIG. 7.17 - Profils de vitesse axiale moyenne obtenus avec le schéma LW cell-vertex .

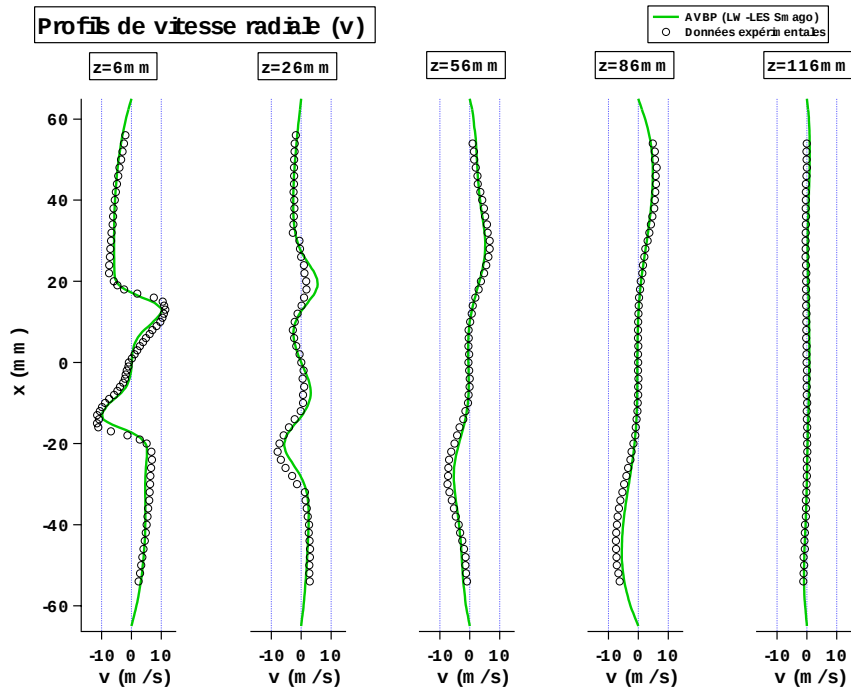


FIG. 7.18 - Profils de vitesse radiale moyenne obtenus avec le schéma LW cell-vertex .

Les figures 7.21 à 7.23 montrent les composantes de la vitesse instantanée. Elles confirment la forte activité turbulente au niveau de la sortie de l'injecteur. De plus, les iso-contours de la vitesse axiale (7.21) mettent en évidence les différentes zones de recirculation. En particulier, on peut constater que la zone

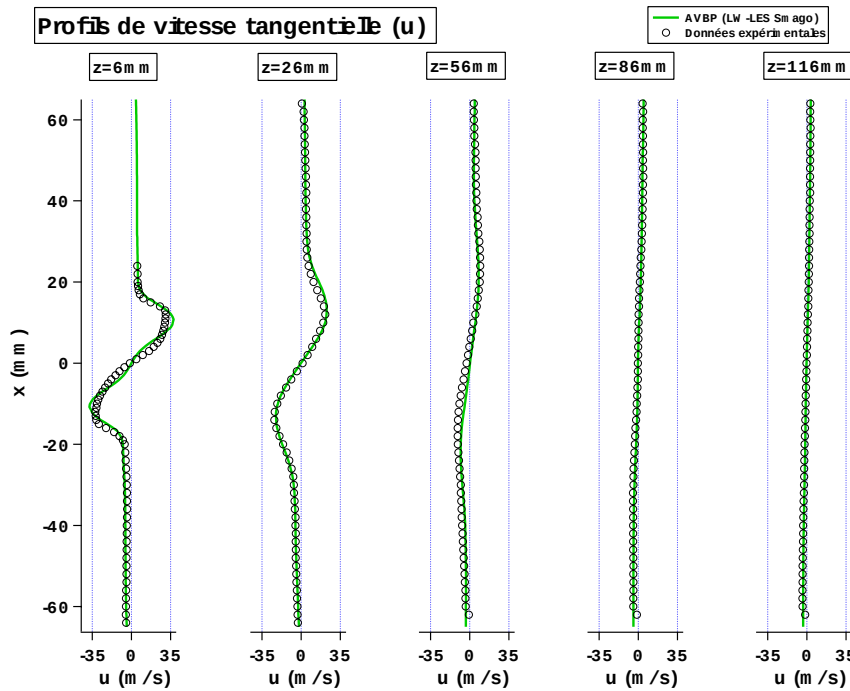
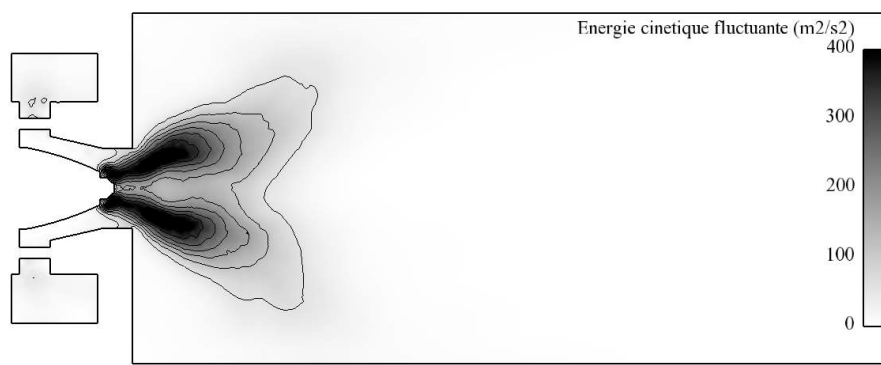


FIG. 7.19 - Profils de vitesse tangentielle moyenne obtenus avec le schéma LW cell-vertex .

FIG. 7.20 - Champ d'énergie cinétique fluctuante. Coupe longitudinale en $x = 0\text{ mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\frac{1}{2}u_k^{RMS}u_k^{RMS}$ dont les valeurs sont comprises entre 0 et $200\text{ m}^2/\text{s}^2$.

de recirculation centrale est en deux parties. Une petite collée à l'atomiseur, avec des vitesses axiales négatives très importantes, et une seconde beaucoup plus grosse, dont les dimensions sont comparables à celle de la chambre, avec des vitesses axiales négatives assez faibles, et qui plaque le jet sur les bords. Ces deux zones peuvent être accrochées ou séparées comme on l'observe sur la figure 7.21. Ceci explique la présence des deux cellules dans la CTRZ sur les champs moyens, mise en évidence sur la figure 7.13.

Champs instantanés La figure 7.24 met principalement en évidence la présence d'instabilités, grâce à des isosurfaces de critère Q (on peut aussi faire apparaître les PVC avec des isosurfaces de pression, car il s'agit de la zone de plus basse pression dans la configuration). Celui-ci permet de détecter les structures tourbillonnaires [105], en comparant tenseur des déformations S_{ij} et tenseur des vitesses de rotations

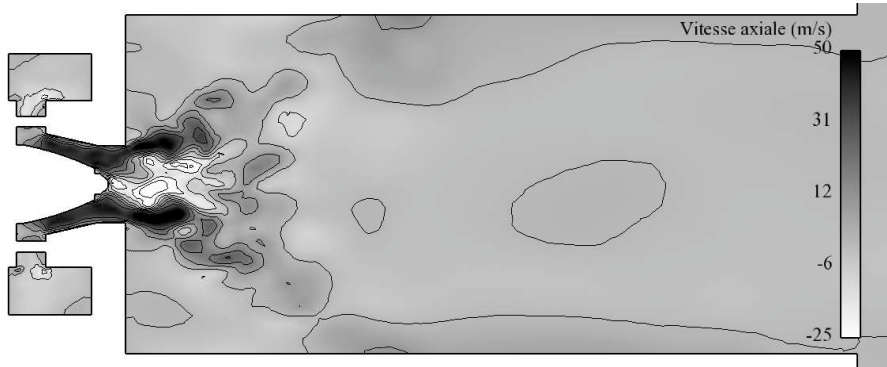


FIG. 7.21 - Champ de vitesse instantanée axiale. Coupe longitudinale en $x = 0\text{mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de u_z dont les valeurs sont comprises entre -30 et 30 m/s.

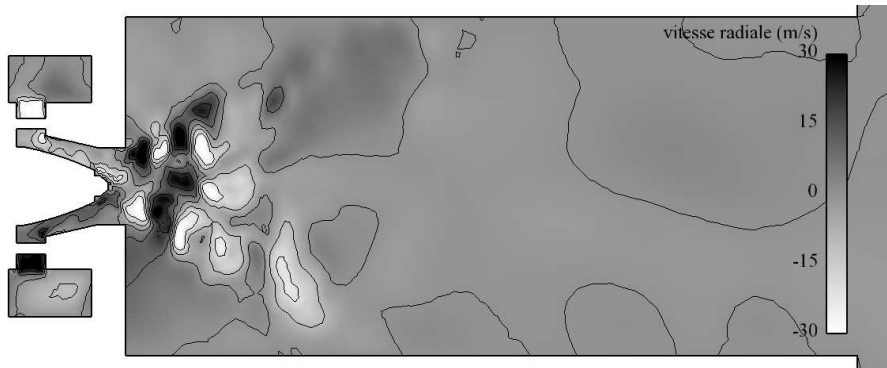


FIG. 7.22 - Champ de vitesse instantanée radiale. Coupe longitudinale en $x = 0\text{mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de u_r dont les valeurs sont comprises entre -20 et 20 m/s.

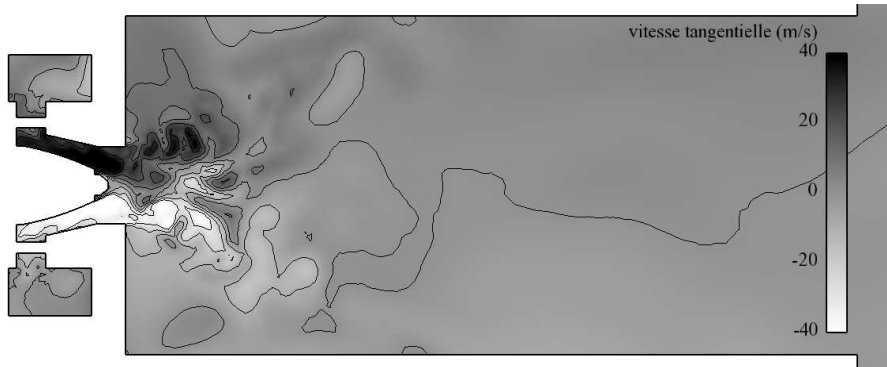


FIG. 7.23 - Champ de vitesse instantanée tangentielle. Coupe longitudinale en $x = 0\text{mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de u_θ dont les valeurs sont comprises entre -30 et 30 m/s.

Ω_{ij} . Son expression est la suivante :

$$Q = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\Omega}} : \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{S}}) = \frac{1}{2} (\Omega_{ij}\Omega_{ji} - S_{ij}S_{ji}) \quad (7.6)$$

Les deux instabilités sont les suivantes :

- PVC : Dans cette configuration, deux PVC s'enroulent autour de la CTRZ, comme on le voit sur la figure 7.24.

- *Vortex rings* : Des instabilités de type Kelvin-Helmholtz se forment au niveau de la couche de cisaillement située à la frontière entre la CRZ et le jet. Celles-ci créent des tourbillons en anneaux. A proprement parler, les anneaux sont en réalité oblongs car déformés par le fort mouvement de précession qui anime l'écoulement.

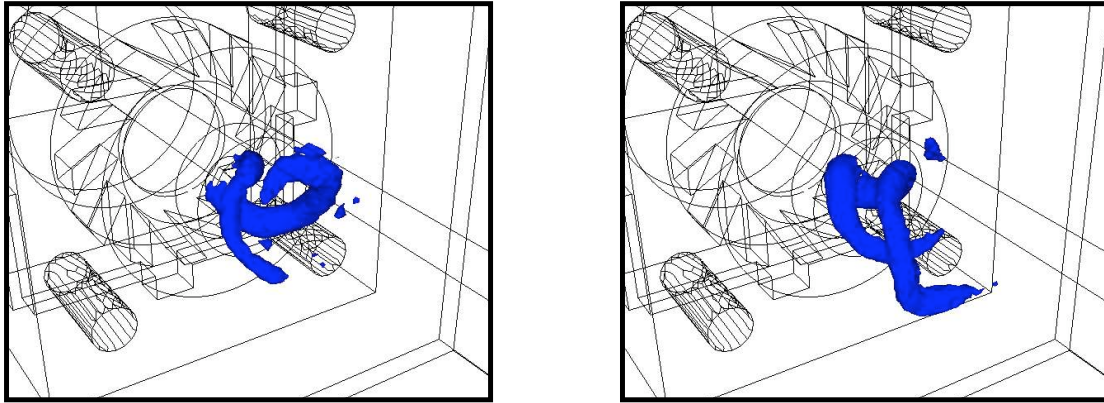


FIG. 7.24 - Mise en évidence du Precessing Vortex Core dans la configuration MERCATO à l'aide d'isosurface de critère Q ($Q \approx 20s^{-2}$) à deux instants différents. On note la présence des deux PVC.

Analyse quantitative - Profils On présente, dans un premier temps, les comparaisons entre données expérimentales et résultats obtenus avec la LES. Les profils sont confrontés aux mêmes abscisses que pour les quantités moyennées. Les figures 7.25, 7.26 et 7.27 indiquent les différentes composantes de la vitesse fluctuante³. A l'instar des grandeurs moyennées, on obtient un très bon accord entre LES et résultats expérimentaux. Il y a toutefois quelques divergences :

- Bien que fournissant le bon ordre de grandeur et un résultat assez fidèle, le calcul ne restitue pas certains pics (en particulier au centre) de vitesses fluctuantes radiale et tangentielle indiqués par l'expérience à 6mm du fond de chambre. Plusieurs hypothèses peuvent expliquer cela. 1) Les niveaux des fluctuations provenant du plénum sont peut-être trop faibles par rapport à la réalité. En effet, la turbulence générée dans celui-ci est, sans doute, en partie dissipée à cause de l'emploi de mailles de taille relativement grande. 2) La partie de sous-maille n'est pas prise en compte dans les résultats LES car non résolue, ce qui est un manque par rapport à l'expérience. 3) Il est possible que le swirler monté sur la configuration réelle ne soit pas parfaitement aligné avec celui calculé dans AVBP. Ainsi, les pales peuvent être décalées selon l'azimut. L'impact global est faible (très bonne concordance entre calculs et résultats expérimentaux). Toutefois, si la mesure de vitesse se fait dans le sillage d'une pale dans l'expérience, mais pas dans le calcul, alors les fluctuations peuvent être légèrement différentes.
- L'amplitude, dans le calcul, des fluctuations est parfois un peu plus faible sur certains profils. On peut donner deux causes : 1) le schéma LW avec l'emploi de viscosité artificielle dissipe plus d'énergie qu'il ne faudrait. 2) la contribution de sous-maille n'est pas prise en compte.

Analyse spectrale La figure 7.28 présente la densité spectrale d'amplitude du signal temporel de pression au point 17. La sonde a été placée à cet endroit, afin de détecter les PVC (d'après les images 7.24). La densité spectrale d'amplitude met en évidence 3 composantes fréquentielles très énergétiques sur le domaine étudié : 800 Hz, 1600 Hz et 3200 Hz. On va s'intéresser principalement aux deux premières.

³Les fluctuations font référence aux variations dues à la turbulence de l'écoulement et à l'acoustique.

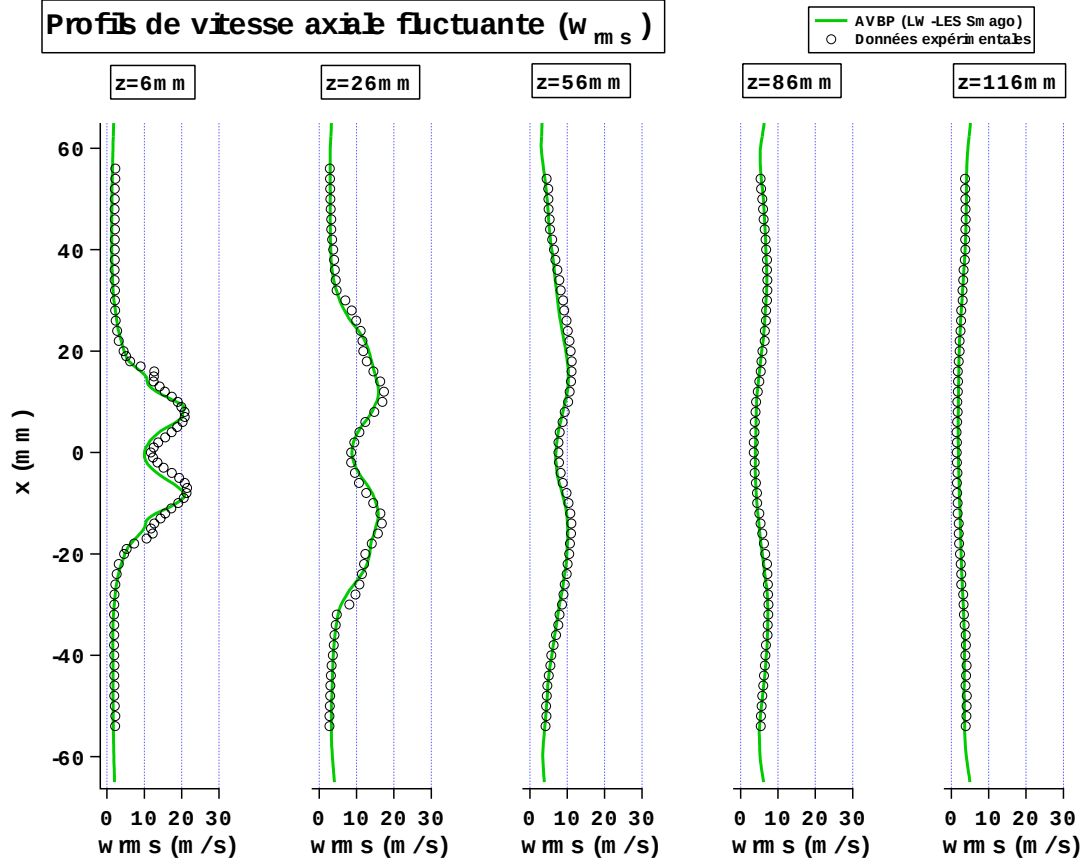


FIG. 7.25 - Profils de vitesse axiale fluctuante obtenus avec le schéma LW cell-vertex .

Le nombre de Strouhal correspondant au phénomène périodique dont l'amplitude spectrale est la plus élevée (soit 1600 Hz d'après la figure 7.28) est donné par :

$$St = \frac{d_{inj} f}{u_{deb}} \quad (7.7)$$

où u_{deb} est la vitesse débitante en sortie de l'injecteur, d_{inj} le diamètre de sortie du diffuseur et f la fréquence du PVC. Dans le cas de MERCATO, on a :

$$\begin{cases} d_{inj} = 29.10^{-3} \text{ mm} \\ f = 1600 \text{ Hz} \\ u_{deb} = 30 \text{ m/s} \end{cases}$$

soit un nombre de Strouhal de 1.54, ce qui est élevé par rapport aux valeurs indiquées dans la littérature pour un PVC. Si en revanche, on considère la composante à 800 Hz, alors $St = 0.77$, ce qui est en accord avec les ordres de grandeurs classiques. La fréquence caractéristique d'un PVC est donc 800 Hz dans cette configuration, à ce point de fonctionnement. D'après des visualisations à l'aide du critère Q, on observe deux PVC. Ceci explique pourquoi c'est à 1600 Hz que la composante spectrale de pression est la plus énergétique. En effet, au centre d'un PVC se trouve une zone de dépression (donc une fluctuation $p' < 0$ par rapport à la pression moyenne). Puisqu'il y a deux PVC, à chaque tour, la sonde voit passer deux dépressions et la fréquence observée est doublée ! La composante à 3200 Hz (1600×2)

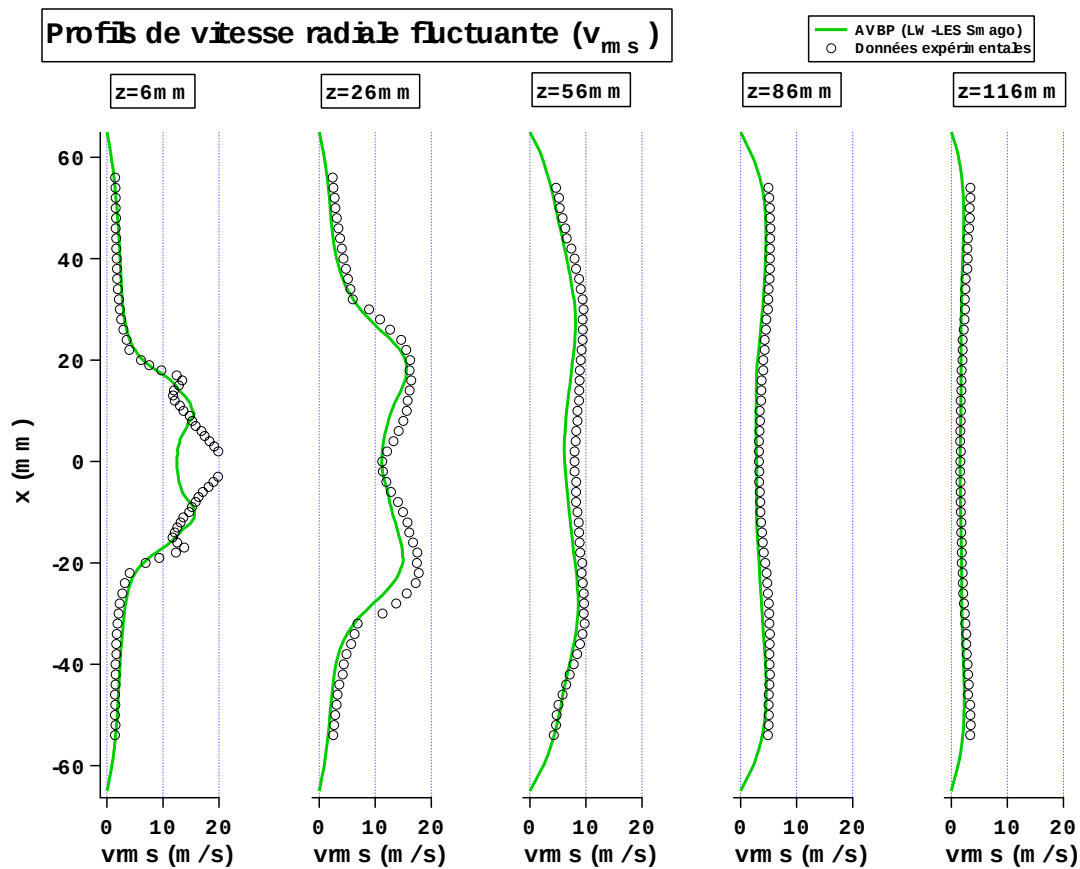


FIG. 7.26 - Profils de vitesse radiale fluctuante moyenne obtenus avec le schéma LW cell-vertex.

est une harmonique de ce phénomène (figure 7.28). De plus, à 4800 puis 6400 Hz, apparaissent d'autres harmoniques dont l'amplitude décroît, à mesure que la fréquence augmente.

Il reste à expliquer comment apparaît une composante à 800 Hz sur le spectre. La figure 7.30 montre des isosurfaces de critère Q à deux instants notés t_1 et t_2 . Au temps t_1 n'apparaît qu'un PVC, tandis qu'à $t = t_2$, on a bien deux tourbillons. Le signal temporel de pression de la figure 7.29 confirme cette observation. Il fait apparaître deux fréquences distinctes dans le temps. Si on isole le signal de pression pendant l'intervalle de temps où on n'observe qu'un PVC et qu'on réalise le spectre d'amplitude, on n'obtient qu'une seule composante évidente à 800 Hz, comme l'indique la figure 7.31 (à gauche). Si en revanche, on réalise la même opération lorsqu'il y a deux PVC, le spectre fait apparaître la composante à 1600 Hz (et son harmonique à 3200 Hz), mais rien de très sensible à 800 Hz, comme le montre la figure 7.31 (à droite). On a donc bien deux phénomènes distincts dans le temps, ce que la transformée de Fourier du signal complet ne permet pas de voir, car elle fait perdre la notion de chronologie.

Le spectrogramme de la figure 7.32 permet de rétablir la chronologie sur le signal complet, sur lequel a été faite l'analyse spectrale du départ (figure 7.28), et d'observer ce saut de fréquence au cours du temps.

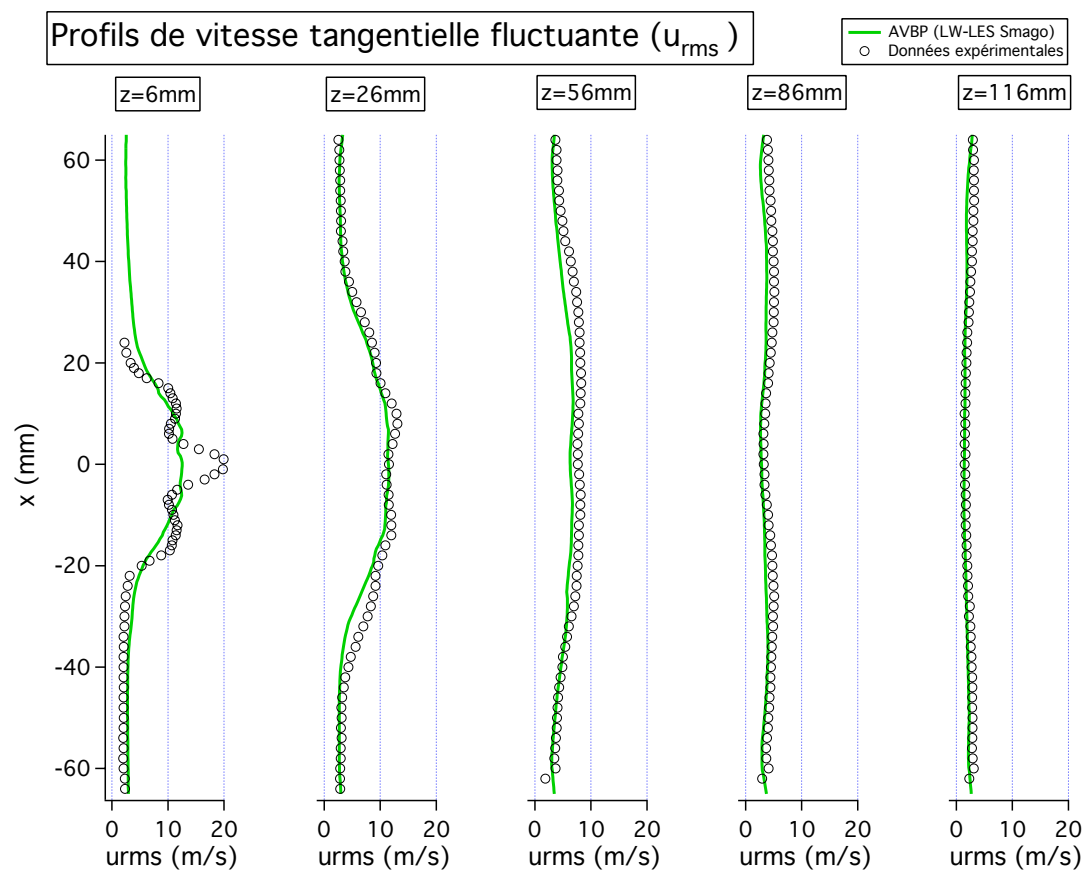


FIG. 7.27 - Profils de vitesse tangentielle fluctuante moyenne obtenus avec le schéma LW cell-vertex.

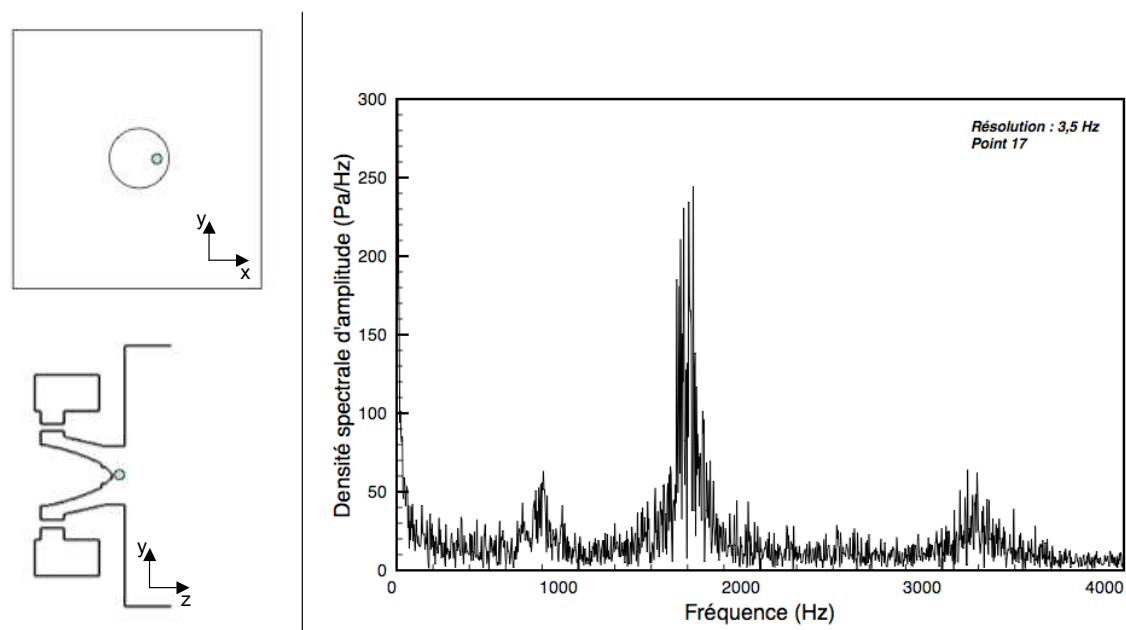


FIG. 7.28 - A gauche : Position du point 17. A droite : Densité spectrale d'amplitude de la pression au point 17. Le pic à 1600 Hz correspond aux deux PVC.

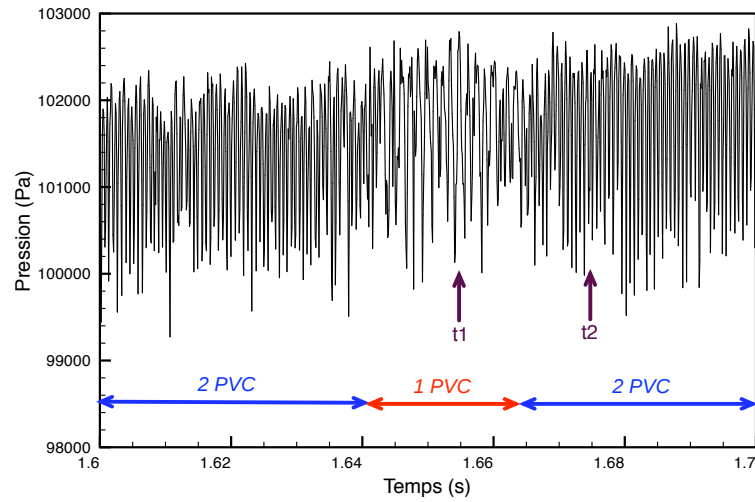


FIG. 7.29 - Une partie du signal temporel de la pression au point 17. On observe que la fréquence change au cours du temps.

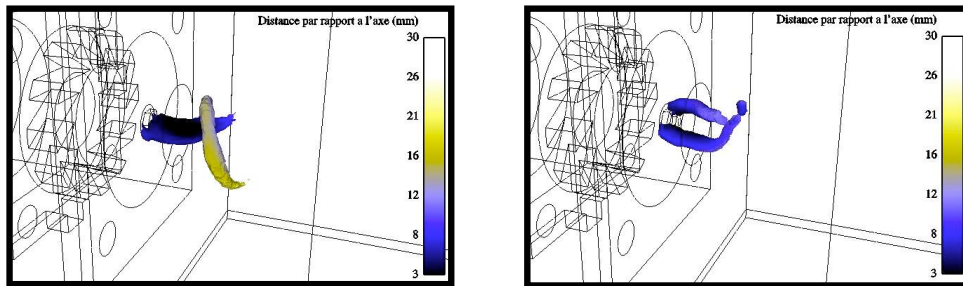


FIG. 7.30 - Isosurfaces de critères Q ($Q = 100s^{-2}$) coloriées par la distance à l'axe (le ou les PVC sont sombres). A gauche : $t = t_1$, on observe 1 seul PVC et une partie d'un vortex ring (en clair). A droite : $t = t_2$, il y a 2 PVC.

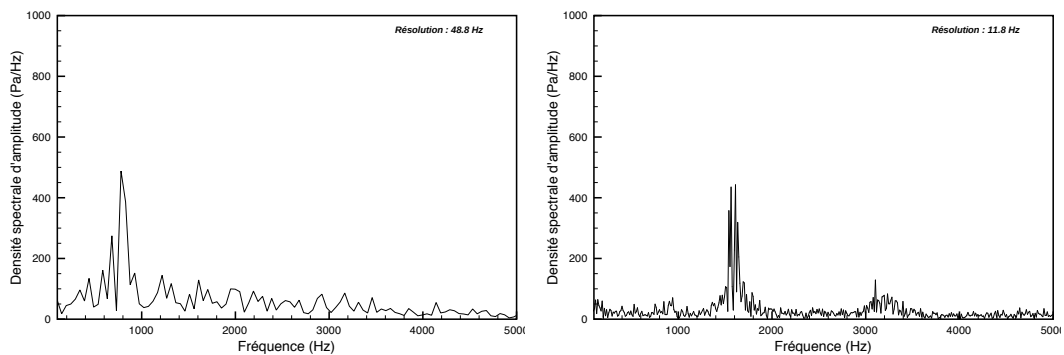


FIG. 7.31 - Densité spectrale d'amplitude du signal temporel de pression au point 17. A gauche : Pour $1,6445 < t < 1,665$ s, il n'y a qu'un seul PVC. A droite, avec $1,665 < t < 1,75$ s, on observe 2 PVC.

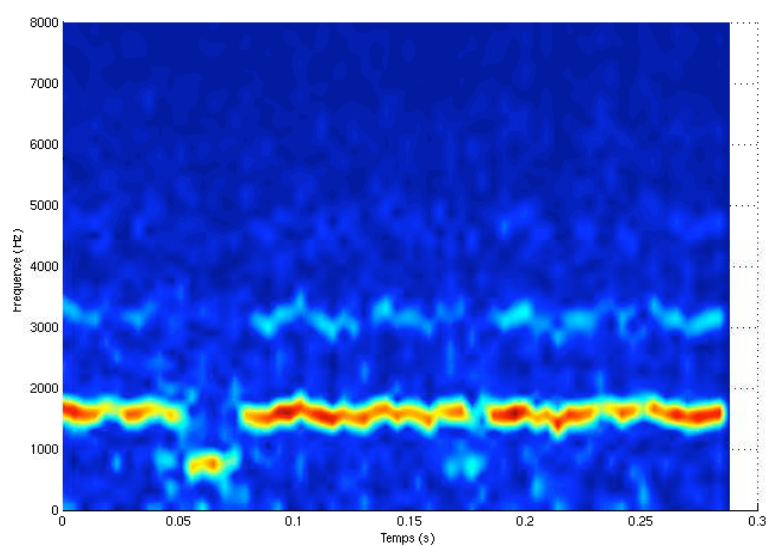


FIG. 7.32 - Spectrogramme du signal de fluctuation de pression du point 17. En abscisse, le temps en seconde et en ordonnée la fréquence en Hertz.

7.3.3 Comparaison entre les différents schémas numériques

Le calcul du champ gazeux a aussi été réalisé avec les schémas Taylor-Galerkin TTGC et TTG4A, le but étant de fournir une comparaison entre les différents schémas d'AVBP pour un cas d'application concret, proche des conditions rencontrées dans les configurations complexes que sont les chambres de combustion industrielles. Afin de pouvoir réaliser une comparaison la plus juste possible, on a réalisé le même calcul en partant de la même solution instantanée, en gardant tous les paramètres identiques (voir tableaux 7.1, 7.2 et 7.3), à l'exception du schéma de convection.

Viscosités et critère de Pope

Viscosités laminaires, turbulentes et artificielles - viscosités du second ordre Dans ce paragraphe, on présente une comparaison entre les différentes viscosités qui interviennent dans le calcul : les viscosités laminaire, turbulente et artificielle. Comme on peut considérer que, dans ce calcul, température et pression sont constantes, on choisit de considérer la viscosité laminaire comme constante et égale à $\nu_{lam} \simeq 3.10^{-5} m^2/s$, correspondant à la température d'entrée de 463 K. La viscosité turbulente ν_t est celle qui est utilisée dans le code, calculée suivant le modèle de Smagorinsky (Eq.(2.73)). Il convient d'indiquer, ici, que l'opérateur de viscosité d'ordre 4 utilisé dans ce calcul a subi une légère modification par rapport à la définition (4.128). En effet, pour assurer la stabilité des calculs (en particulier pour les schémas TTG), on ajoute une petite quantité de viscosité d'ordre 4 à la quantité de mouvement (10% de la viscosité d'ordre 4 ajoutée sur les équations des espèces et de l'énergie totale, ce qui revient à remplacer les zéros dans la matrice de (4.128) par 0.1), ce qui correspond à l'option $iavisc = 3$ dans le code).

La première comparaison est fournie par la figure 7.33. Qualitativement, on n'observe pas de différences sensibles entre les trois calculs. Les niveaux de viscosité turbulente sont, en effet, très semblables. Comme on pouvait s'y attendre, le calcul TTGC reste celui dans lequel le modèle de turbulence agit le plus. Comme le souligne Selle [216], il s'agit, en effet, du cas le plus favorable car les structures turbulentes sont plutôt dissipées par le modèle de sous-maille que par le schéma numérique ou la viscosité artificielle. On soulignera que, dans tous les cas, les niveaux de viscosité turbulente ne sont pas trop élevés (aux alentours de 10 fois la viscosité laminaire en moyenne).

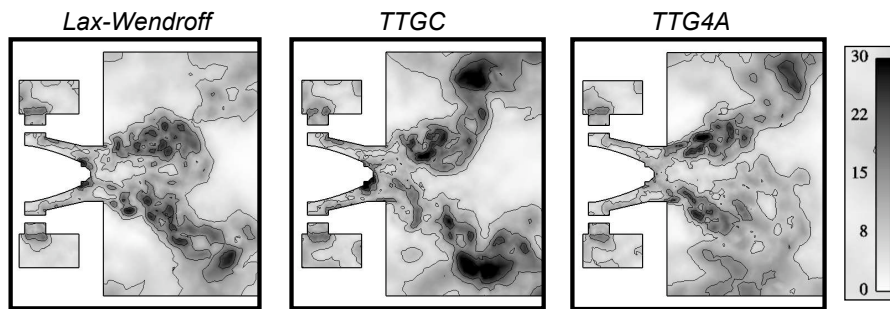


FIG. 7.33 - Rapport ν_t/ν_{lam} entre la viscosité turbulente et la viscosité laminaire. - Champs instantanés pris au même temps physique.

Suite à l'analyse monodimensionnelle réalisée sur la viscosité artificielle du second ordre (section 5.4), on peut, par post-traitement, calculer une viscosité artificielle à comparer avec la viscosité laminaire. Pour ce faire, il faut émettre quelques hypothèses mais permettant néanmoins le calcul ν^{AV} . On indique

en italique les limites de celles-ci, afin de mettre en garde le lecteur. On peut cependant penser que ce calcul permet au moins de fournir, *a posteriori*, des ordres de grandeur et des tendances.

- L'opérateur de diffusion de la viscosité artificielle d'ordre 2 est le même que l'opérateur utilisé pour les viscosités laminaires et turbulentes. *Comme on en a discuté dans la partie II, ceci n'est pas le cas sauf sur un maillage régulier en 1D.*
- Le coefficient ν^{AV} , obtenu dans l'analyse monodimensionnelle, est utilisable directement pour le cas 3D. *Là encore, l'écriture exacte de ce coefficient (fournie section 5.4) est possible uniquement sur maillage régulier et orthogonal.*
- h en 1D désigne la taille d'une cellule. En 3D, il s'agit donc de trouver une longueur caractéristique représentative du volume de contrôle considéré. Par simplicité, on choisit $h_j = (V_j)^{1/d}$ où h_j et V_j sont respectivement les longueur caractéristique et volume associés au noeud j .

Avec toutes ces hypothèses, on rappelle l'expression de la viscosité artificielle, obtenue à partir de l'équation (5.56), à la section 5.4 :

$$\nu_j^{AV} = \frac{\epsilon^{(2)} \zeta_j V_j^{2/3}}{4\Delta t}$$

La figure 7.34 indique le rapport entre la viscosité artificielle ν^{AV} et la viscosité turbulente ν_t . Globalement, dans les trois cas, on note que la viscosité artificielle est très faible en comparaison de la viscosité turbulente (et de la viscosité laminaire qu'on note ici ν_{lam}). Cette conclusion n'est pas surprenante dans un calcul à froid tel que celui-ci. Le senseur de viscosité écrit par Colin est en effet très local et dans un calcul sans flamme, celui-ci s'active très peu et faiblement, ce qui explique les faibles quantités de viscosité artificielle. Les résultats auraient sans doute été bien moins rassurants avec le senseur de Jameson [216].

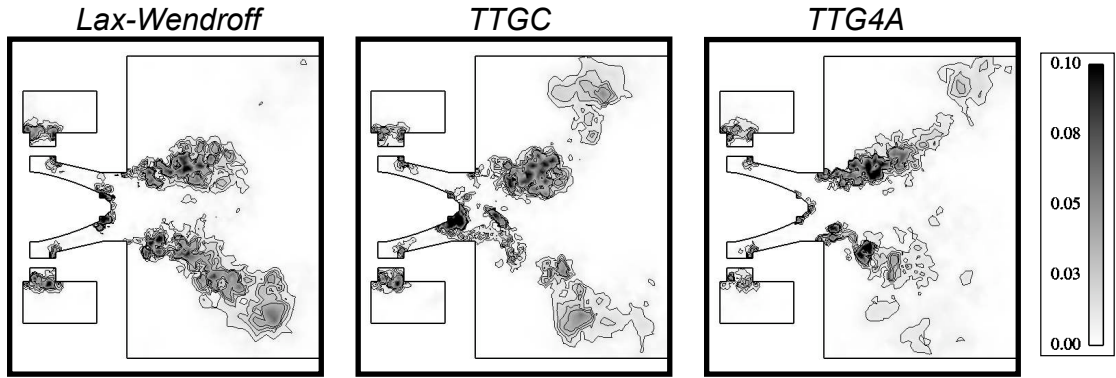


FIG. 7.34 - Rapport ν^{AV} / ν_{lam} entre la viscosité artificielle et la viscosité laminaire. - Champs instantanés pris au même temps physique.

Critère de Pope Ce critère a été introduit par Pope [178, 179] afin d'évaluer la qualité d'une simulation aux grandes échelles. Pour ce faire, il compare les énergies cinétiques turbulentes résolues et de sous-maille. La définition du critère est la suivante :

$$M = \frac{\langle k_{res} \rangle}{\langle k_{res} \rangle + \langle k_{sgs} \rangle} \quad (7.8)$$

où k_{res} et k_{sgs} sont respectivement les énergies cinétiques turbulentes résolue et de sous-maille moyennes. Selon Pope [179], on peut considérer que la LES est de bonne qualité pour des valeurs de

$M \geq 0.8$. L'énergie cinétique turbulente de sous-maille k_{sgs} n'est pas calculée explicitement par le code et on peut la reconstruire lors du post-traitement en utilisant la relation [206] :

$$\nu_t = C_M \Delta \sqrt{k_{sgs}} \quad (7.9)$$

où $C_M = 0.069034$ et Δ est la taille du filtre (on prend la racine cubique du volume de contrôle associé aux noeuds). La figure 7.35 présente le critère de Pope sur une coupe longitudinale utilisée dans l'injecteur et la chambre. Celui-ci est représentatif des trois calculs. Le critère est unitaire quasiment partout dans la chambre, ce qui sous-entend que la résolution spatiale du maillage est suffisante. Dans l'injecteur, à la sortie des vrilles, le résultat est légèrement moins bon. Toutefois, les valeurs obtenues ici indiquent que, dans son ensemble, cette LES est de bonne qualité.



FIG. 7.35 - Critère de Pope pour le calcul à froid monophasique pour le schéma LW.

Hyperviscosités artificielle et numérique - viscosité de quatrième ordre En plus des viscosités du deuxième ordre étudiées ci-dessus, le code utilise aussi une hyperviscosité artificielle κ^{AV} , notamment pour dissiper les hautes fréquences, qui sont, la plupart, du temps non physiques. Celle-ci est activée partout, sauf aux endroits où la viscosité d'ordre 2 agit de façon sensible (voir la définition de $\epsilon^{(4*)}$ dans la section 4.11). Le coefficient κ^{AV} est à comparer à la diffusion numérique d'ordre 4, propre aux schémas centrés utilisés dans AVBP et dont le premier terme de diffusion dans l'erreur de troncature comprend une dérivée d'ordre 4 (voir section 5.2).

On procède ici comme pour le calcul de la viscosité artificielle d'ordre 2. Partant des analyses monodimensionnelles (sections 5.2 et 5.3), on calcule une estimation des hyperviscosités artificielle et numérique pour les calculs LES considérés ici. Une fois encore, pour réaliser l'estimation de κ^{AV} et κ^{num} , on a recours aux hypothèses suivantes :

- On considère que l'opérateur de viscosité d'ordre 4 est consistant et approxime une dérivée d'ordre 4 (*Dès que le maillage est non uniforme, ça n'est plus le cas*).
- On peut utiliser le coefficient obtenu dans l'analyse monodimensionnelle directement pour le cas 3D. *Comme pour la viscosité artificielle d'ordre 2, l'écriture exacte de ce coefficient (fournie section 5.4) est possible uniquement sur maillage régulier.*

On peut donc écrire la viscosité artificielle d'ordre 4 de la manière suivante (voir section 5.4) :

$$\kappa_j^{AV} = \frac{\epsilon_j^{(4*)} V_j^{4/3}}{16\Delta t}$$

On peut, de même, utiliser le coefficient apparaissant devant la dérivée d'ordre 4 dans l'erreur de troncature, pour évaluer la viscosité numérique d'ordre 4 des schémas (*Comme pour l'hyperviscosité, cette erreur est obtenue sur maillage monodimensionnel et régulier*). On rappelle ces hyperviscosités numériques apparaissant dans les erreurs de troncature des schémas étudiées ici (voir Eq.(5.36)-(5.55) et (5.54)) :

$$\begin{aligned}\kappa^{LW} &= \frac{ch^3}{8}\nu(1-\nu^2) \\ \kappa^{TTGC} &= \frac{ch^3}{24}\nu(\nu^2-2\gamma) \\ \kappa^{TTG4A} &= \frac{ch^3}{24}\nu\end{aligned}$$

Il reste à estimer dans ces formules c , h et ν . En effet, les erreurs de troncature ont été obtenues dans un cas de convection linéaire à coefficients constants ! Pour h , on emploie la même méthode que pour la viscosité artificielle. Pour c et ν , on ajoute quelques hypothèses :

- On utilise la norme de la vitesse locale $\|\vec{u}\|$ comme vitesse de convection (on considère le transport d'un tourbillon).
- Le CFL correspond à un CFL convectif donc là aussi, on choisit $c = \|\vec{u}\|$ et on a : $\nu_j = \frac{\|\vec{u}_j\|\Delta t}{V_j^{1/3}}$.

On obtient donc pour Lax-Wendroff, en 3D et en un noeud j :

$$\kappa_j^{LW} = \frac{\|\vec{u}_j\|V_j}{8} \left(\frac{\|\vec{u}_j\|\Delta t}{(V_j)^{1/3}} \right) \left[1 - \left(\frac{\|\vec{u}_j\|\Delta t}{(V_j)^{1/3}} \right)^2 \right]$$

Les figures 7.36 et 7.37 illustrent la quantité d'hyperviscosité introduite par les différents schémas numériques, ainsi que l'hyperviscosité artificielle (qui est sensiblement la même pour les trois schémas)⁴. La viscosité artificielle d'ordre 4 ne dépend quasiment que de la taille de maille, car le senseur ζ_p s'active très peu dans ces calculs. On commente, tout d'abord, les résultats obtenus pour les schémas LW et TTG4A, le cas de TTGC est évoqué plus loin.

Dans l'injecteur et à sa sortie, ce sont principalement les schémas qui contrôlent la dissipation. En revanche, près des bords, et dès qu'on s'éloigne de la zone la plus raffinée du maillage (indiquée par l'iso-contour sur la figure 7.37, à droite - attention, l'image est légèrement déformée par rapport aux autres vues similaires), l'opérateur $D^{(4*)}$ reprend le dessus⁵. Par conséquent, ici, la qualité de la résolution de la zone la plus active, en terme de turbulence, dépend du schéma et pas des opérateurs de stabilisation, ce qu'on recherche *a priori*. Globalement, le schéma TTG4A injecte moins d'hyperviscosité que le schéma LW, ce qui en fait un meilleur candidat pour la LES. En outre, en comparant les hyperviscosités numériques, on ne parle que d'erreur de diffusion. Or, il faut rappeler que le plus gros avantage de TTG4A sur LW est bel et bien sa faible erreur de dispersion. Cette étude assez simple démontre donc que TTG4A est aussi plus avantageux, en ce qui concerne la dissipation.

Intéressons nous enfin au cas du schéma TTGC qui apparaît ici bien singulier (sans pour autant que cela soit surprenant, lorsqu'on étudie en détail son erreur de troncature). Si on se réfère à la figure 7.36 (à droite), TTGC est anti-dissipatif (hyperviscosité négative) et donc devrait être instable ! Théoriquement,

⁴Dans le cas des équations des espèces et de l'énergie totale, il faut multiplier par 10 la quantité indiquée

⁵On note d'ailleurs, dans le cas des équations d'énergie et des espèces, que la zone, où les schémas dissipent plus que l'opérateur de viscosité artificielle, est plus restreinte

pour qu'un schéma soit stable, les coefficients multipliant les dérivées d'ordre pair doivent être alternativement positifs et négatifs [100]. Il s'agit d'ailleurs d'une méthode souvent employée pour déterminer le domaine de stabilité d'un schéma. Pour la stabilité, κ doit être, en principe, positif. Ainsi pour LW, on peut voir que κ^{LW} devient négatif quand le CFL devient plus grand que 1, ce qui donne sa limite de stabilité. Dans le cas de TTGC, pour certains γ et CFL donnés, le coefficient κ^{TTGC} est négatif là où, pourtant, le schéma est stable en norme L^2 ! En regardant les termes d'ordre plus élevés dans l'erreur de troncature, on observe, de la même manière, un comportement opposé à celui attendu, ce qui explique, sans doute, la raison pour laquelle TTGC est finalement stable. La conséquence de cette curieuse observation sur le comportement du schéma TTGC n'est pas claire. Visiblement, il ne semble pas que cela nuise à sa stabilité. On peut toutefois légitimement se demander si, dans certains cas, cette particularité ne pourrait pas engendrer une divergence (au moins localement) du calcul.

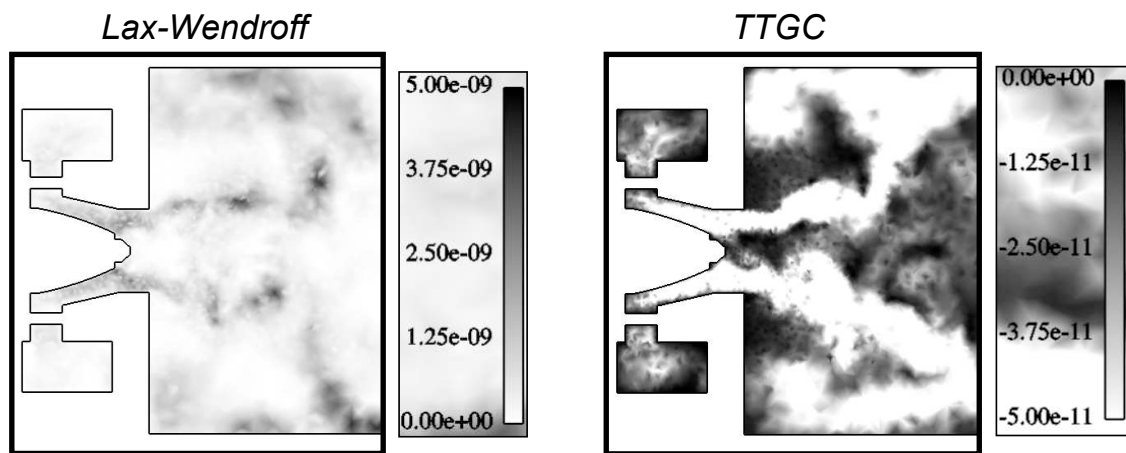


FIG. 7.36 - Hyperviscosité numérique basée sur une analyse monodimensionnelle des erreurs de troncature des schémas LW et TTGC - Champs instantanés pris au même temps physique. (unités : m^4/s)

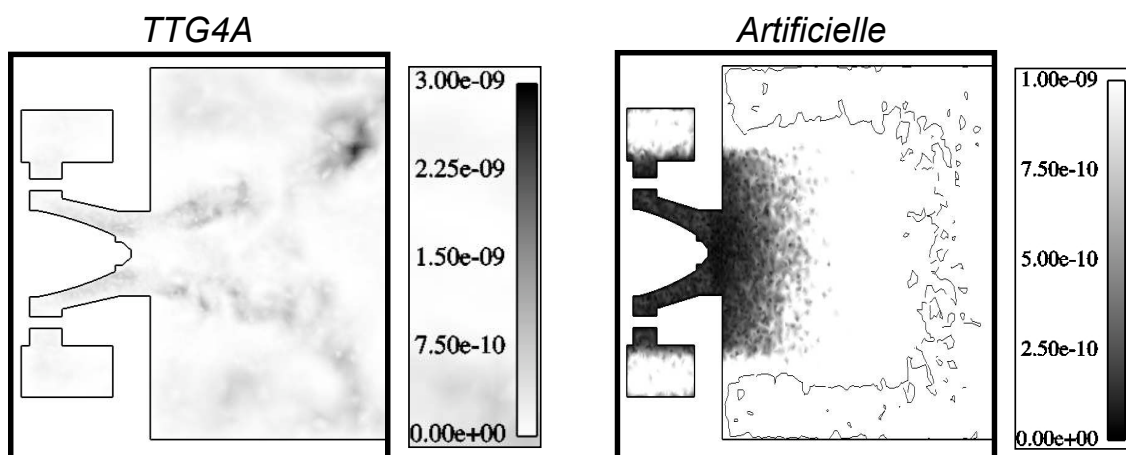


FIG. 7.37 - Hyperviscosité numérique basée sur une analyse monodimensionnelle de l'erreur de troncature du schéma TTG4A (à gauche) et hyperviscosité artificielle - Champs instantanés pris au même temps physique. (unités : m^4/s)

Une remarque supplémentaire

Les hypothèses, émises pour pouvoir réaliser les calculs *a posteriori* des viscosités et hyperviscosités, sont fortes et l'analyse présentée constitue une première estimation, afin de mettre en évidence les différences entre les schémas. Cependant, il semble que les tendances soient en accord avec les résultats obtenus. L'aspect le plus limitant, dans cette étude, reste l'absence de prise en compte de la variation de taille de maille. Or, un simple calcul d'erreur de troncature monodimensionnel sur maillage irrégulier met en évidence que de nouveaux termes apparaissent. Si on prend l'exemple d'un maillage donc le rapport de deux mailles consécutives est β (soit $x_j - x_{j-1} = h$ puis $x_{j+1} - x_j = \beta h$), on a, pour un schéma centré *cell-vertex* :

$$\left. \frac{\delta \phi}{\delta x} \right|_j^{CV} \simeq \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_j + \frac{h(\beta - 1)}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_j + \dots$$

En règle générale, l'ordre de convergence est conservé car on a souvent $\beta = 1 + \mathcal{O}(h)$. En revanche, l'erreur n'est plus une dérivée d'ordre impair (dispersion), mais d'ordre pair (diffusion d'ordre 2, comme pour les diffusions laminaire et turbulente !). Dans l'analyse qui précède, on ne tient pas compte de cette remarque et il est donc possible qu'on omette une partie non-négligeable de la diffusion introduite dans le calcul.

7.3.4 Conclusions

– **Sur la méthodologie LES pour simuler un écoulement turbulent avec *swirl***

A l'instar de calculs déjà réalisés avec le code AVBP [116, 137, 216], le calcul de l'écoulement à froid dans la chambre de combustion du banc MERCATO met en évidence la capacité du code de calcul à réaliser une LES robuste et de qualité, permettant de reproduire les principaux phénomènes connus dans ce type d'écoulement. La confrontation avec l'expérience indique que les composantes de la vitesse moyenne sont retrouvées avec précision. Il en est de même pour les grandeurs fluctuantes.

- **Sur l'influence des schémas numériques sur une telle configuration** Compte tenu de la résolution spatiale utilisée pour cette simulation et des données expérimentales disponibles, l'apport des schémas d'ordre plus élevé n'est pas évident. Les résultats obtenus sont sensiblement les mêmes pour un coût de calcul plus important. Il est certain que pour observer des phénomènes beaucoup plus fins ou réaliser des calculs à nombres de Reynolds plus élevés ou de l'aéroacoustique, les schémas Taylor Galerkin seront clairement supérieurs, comme l'attestent les cas académiques étudiés, dans la partie précédente. Néanmoins, pour retrouver les premiers moments des vitesses et les instabilités hydrodynamiques principales d'un écoulement, tout en assurant une certaine robustesse (ce qui fait gagner un temps précieux dans l'optique d'obtenir des résultats fiables rapidement), il semble que le schéma LW soit suffisant.

On peut, dès lors, se demander pour quelles raisons la différence entre les trois schémas est si faible ?

Comme l'avait souligné Selle [216], l'énergie des écoulements, dans des configurations telles que MERCATO, est principalement répartie dans les basses fréquences. L'objet le plus énergétique est le PVC (ou les deux PVC le cas échéant). Celui-ci est résolu sur environ 30 à 100 mailles dans la direction principale de la chambre. Si on se réfère au tableau 5.3, relatif aux vitesses de groupe (et *a fortiori* aux qualités en termes de résolution des schémas numériques), on note que, dans le cas du schéma LW, on ne commence à commettre une erreur de dispersion qui n'est plus négligeable (quoique 5% d'erreur sur la vitesse de groupe reste relativement faible !) que pour des longueurs

d'onde bien plus petites (en dessous de 20 points par longueur d'onde). Ceci explique pourquoi les différences entre les schémas testés sont si faibles sur le calcul MERCATO.

7.4 Géométrie B - écoulement diphasique réactif

On présente dans cette section, les résultats obtenus en simulant l'écoulement turbulent diphasique et réactif dans la configuration B. D'un point de vue expérimental, les données fournies proviennent uniquement de mesures via PIV (Vélocimétrie par Images de Particules ou *Particle Image Velocimetry*), en utilisant les gouttes de fuel comme ensemencement. On n'a donc que des mesures de vitesses dans les gaz frais et ces vitesses correspondent à la phase liquide. On cherche à atteindre deux objectifs dans cette partie :

- Le premier est numérique : on démontre que la méthodologie adoptée ici pour la simulation de la combustion turbulente diphasique est stable et permet de fournir des résultats réalistes et en accord avec l'expérience.
- Le second est physique : on fournit une description des événements se produisant dans la chambre étudiée.

7.4.1 Conditions limites et initiale - partie gazeuse

Calculs et expériences sont faits aux conditions atmosphériques (fixées ici à $T = 285\text{ K}$ et $p = 1\text{ atm}$). Les valeurs cibles imposées aux frontières sont donc modifiées par rapport aux calculs monophasiques présentés section 7.3. En revanche, le type de conditions utilisées reste le même (méthodes caractéristiques - approche temporelle en entrée, spatiale en sortie). Les murs sont modélisés par des lois de parois, à l'exception de ceux de la trompe d'aspiration qui sont décrits par des conditions de "murs glissants adiabatiques" (moins coûteux en temps de calcul). Le tableau 7.4 résume les conditions limites utilisées pour le gaz.

Paramètres	Choix / Valeurs
Entrée du plénum	Entrée NSCBC à débit imposé (approche temporelle) $\dot{m} = 26\text{ g/s}$ $T = 285\text{ K}$ <i>mélange : air (N_2/O_2)</i>
Sortie	Sortie NSCBC avec pression imposée $p = 101300\text{ Pa}$
Parois de la chambre	Murs adiabatiques avec lois de parois
Parois de la trompe aspirante	Murs adiabatiques glissants

TAB. 7.4 - Conditions limites pour la phase porteuse dans le calcul diphasique réactif sur la configuration B

La condition initiale pour le gaz est de l'air à $T = 285\text{ K}$ et $p = 1\text{ atm}$.

7.4.2 Conditions limites et initiale - partie liquide

Modélisation de l'injection

Contrairement à tous les calculs diphasiques en géométries complexes faits jusqu'à présent avec AVBP, les conditions d'entrées du gaz et du liquide ne sont pas situées aux mêmes endroits (l'atomiseur se trouve bien en aval de l'injection d'air). A l'heure actuelle, il est possible de simuler l'atomisation de jets ou de nappes liquides, via des méthodes de suivi ou de capture d'interfaces (Front-Tracking, Level-Set [242, 52]). Ces simulations se font généralement dans des géométries très simples, sur des maillages structurés (notamment à cause des schémas numériques utilisés) et la résolution nécessaire implique l'utilisation d'un très grand nombre de points. Il n'est donc pas encore question d'une géométrie complexe, comme celle du banc MERCATO.

Par ailleurs, une fois les gouttes suffisamment petites, il faut pouvoir envisager de résoudre le spray obtenu avec des méthodes Lagrangiennes ou Eulériennes, telles qu'on les a décrites dans le chapitre 1. Le couplage, entre le solveur simulant les atomisations primaires et secondaires et le solveur calculant la dispersion du spray, est un point particulièrement délicat. Le calcul des atomisations primaire et secondaire n'est pas envisageable pour la simulation qu'on cherche à réaliser ici (sans même considérer le fait que ces méthodes ne sont pas codées dans AVBP !). On ajoute, toutefois, que le couplage entre un code de suivi d'interfaces (méthode Level-Set avec raffinement de maillage) et d'un solveur Lagrangien est envisageable, à moyen terme (voir la présentation de M.Hermann au Summer Program du CTR en 2006).

Les atomisations primaires et secondaires se produisent, en général, dans les premiers millimètres en aval de la sortie de l'atomiseur [121] et leur résolution est primordiale si on cherche à connaître, avec précision, la distribution de tailles de gouttes. Dans la mesure où la phase liquide est supposée mono-disperser dans les simulations qu'on va présenter, on décide donc de ne pas simuler, ni modéliser ces phénomènes dans cette zone. On choisit d'imposer une condition limite au niveau de la sortie de l'atomiseur, afin de pouvoir obtenir des profils de vitesse, en accord avec l'expérience quelques millimètres en aval, et obtenir le bon champ de vitesses moyennes des gouttes. Pour ce faire, les composantes de vitesse, imposées au niveau de la condition limite, doivent être suffisamment précises (par opposition au profil plat qu'on a imposé pour l'injection du gaz dans le plénum, par exemple). Afin d'assurer la stabilité du calcul et faciliter l'imposition de profils de vitesse, on apporte une modification de la géométrie initiale, comme on le décrit sur la figure 7.38 et on le voit figure 7.39⁶. Le but est, en effet, d'augmenter la surface d'injection et ce, pour trois raisons :

- Pour imposer des profils de vitesse suffisamment réguliers à la phase liquide, dans la méthode Euler-Euler, il faut au minimum une dizaine de points dans un diamètre. La surface située à la pointe de l'atomiseur (figures 7.38 et 7.39), dans la géométrie initiale, ne peut pas être maillée aussi finement (le pas de temps chuterait dramatiquement, le nombre de points augmenterait de manière très sensible et la variation de taille de mailles serait très importante autour de l'atomiseur).
- La traînée ayant un faible impact au début (on rappelle que le Stokes est plus grand que 1), les vitesses d'injection doivent être de l'ordre de grandeur des vitesses observées expérimentalement sur les profils les plus proches de l'injecteur (de l'ordre de 20-30 m/s). Si l'aire d'injection est trop faible, la fraction volumique de liquide devient bien trop importante. Il existe des modèles pour les sprays denses mais : 1) la stabilité des méthodes numériques utilisées peut se dégrader

⁶La section hexagonale a, par la suite, été remplacée par une section circulaire, pour simplifier la condition limite. On n'a pas observé de différences majeures au niveau des champs gazeux entre les deux géométries.

considérablement et 2) on veut éviter de trop interagir avec la phase porteuse (par couplage inverse de la traînée entre le liquide et le gaz).

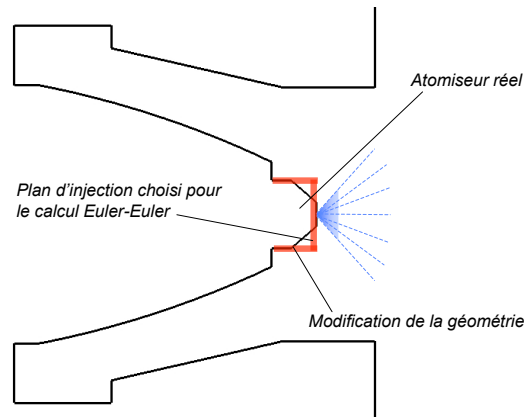


FIG. 7.38 - Schéma présentant la stratégie adoptée pour l'injection du liquide.

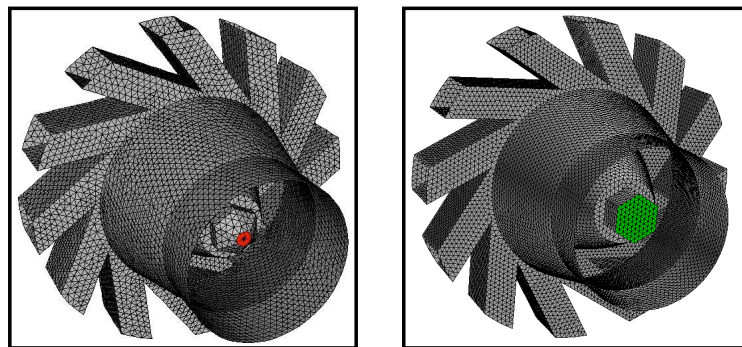


FIG. 7.39 - Modification de la tête de l'atomiseur dans la configuration B (à droite). La surface d'injection de liquide est donc augmentée.

L'ensemble de ces contraintes mène aux profils de vitesses utilisés pour l'injection de liquide sur la figure 7.40. On a choisi de fixer α_p , n_p et T_p , **constants sur la zone d'injection**, pour éviter de générer des gradients de diamètre qui pourraient déstabiliser le calcul. Le diamètre est fixé à 40 microns à l'injection. Ce choix repose sur une étude des résultats obtenus par l'ONERA, montrant que la classe de gouttes ayant un diamètre autour de 40 microns est la plus représentative. Les profils de vitesse sont construits de façon à reproduire un spray creux conique, car le jet liquide a un mouvement de swirl. Le débit de liquide $\dot{m}_p$, l'aire d'injection S_{inj} et la masse volumique ρ_p étant imposés, on a un degré de liberté sur le choix de la vitesse débitante $u_{deb,p}$ et on en déduira la fraction volumique à l'injection α_p et le nombre de gouttes n_p . Compte tenu des profils expérimentaux (pour la valeur de la vitesse), on impose $\{u_{deb,p}\}_{inj} = 20\text{ m/s}$ où l'opérateur $\{\cdot\}_{inj}$ indique une moyenne spatiale sur la surface d'injection. La valeur moyenne de la fraction volumique de liquide à l'injection en découle : $\{\alpha\}_{inj} = 2,644.10^{-3}[-]$. Toutes ces données sont rassemblées dans le tableau 7.5.

Paramètres	Valeurs
Vitesse débitante moyenne	20m/s
Fraction volumique moyenne	$2,644.10^{-3}$
Diamètre des gouttes	$40\mu\text{m}$
Densité de gouttes	$7,89.10^{10} \#/\text{m}^3$

TAB. 7.5 - Conditions limites pour la phase dispersée au niveau de l'atomiseur

La figure 7.40 présente les profils utilisés pour les vitesses normale (ou débitante), tangentielle et radiale dans la direction Ox (profils à symétrie de révolution autour de l'axe Oz de la chambre). Ceux-ci ont été imposés de façon à obtenir une forme de spray en cône creux, comme observé expérimentalement.

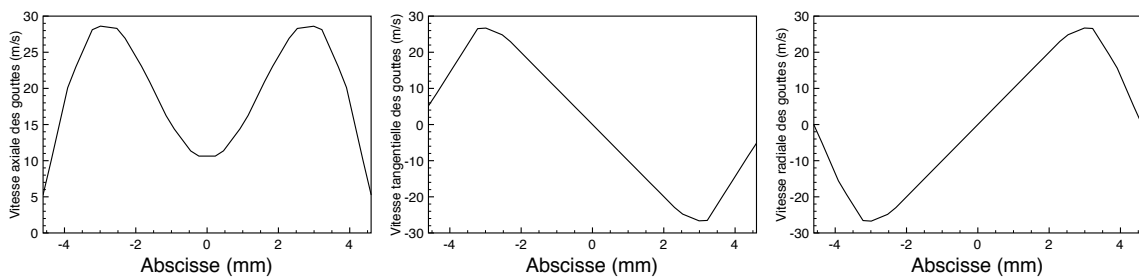


FIG. 7.40 - De gauche à droite : profils de vitesses axiale, tangentielle et radiale des gouttes. Le diamètre est constant ($40\mu\text{m}$) et la charge volumique homogène sur la condition limite ($\alpha_p = 2.64 \cdot 10^{-3}$).

Résumé des conditions limites et initiale

Le tableau 7.6 rassemble les différentes conditions limites utilisées pour la phase dispersée.

Paramètres	Choix / Valeurs
Injection	Entrée Dirichlet avec $\alpha_p, \vec{u}_p, T_p, n_p$ imposées $\dot{m}_p = 2,9 \text{ g/s}$ $T_p = 285\text{K}$ <i>Le détail des profils est fourni dans le paragraphe précédent.</i>
Sortie	Aucune grandeur imposée
Parois	Murs glissants (vitesse normale nulle)

TAB. 7.6 - Conditions limites pour la phase dispersée dans le calcul diphasique réactif sur la configuration B.

7.4.3 Maillage

Les caractéristiques du maillage dans le plénum (tableau 7.4.3) et dans la chambre sont globalement les mêmes que pour celui utilisé dans la géométrie A, pour le cas monophasique (figure 7.41). Comme on avait déaffiné dans l'atmosphère, on procède de même dans la manchette et la trompe aspirante. Néanmoins la résolution reste suffisante pour résoudre les plus grandes structures de l'écoulement et surtout l'acoustique. Aux alentours de l'atomiseur, le maillage est plus fin que dans la configuration, notamment pour résoudre au mieux les gradients de α_p entre la zone où se trouve le spray et la zone où il

n'y a pas de goutte. La figure 7.42 montre une coupe longitudinale du maillage. On note que l'atomiseur n'a plus la même forme que dans le cas monophasique, précédemment décrit.

Paramètres	Choix / Valeurs
Noeuds N_h	271179
Cellules N_K	1426795
Volume minimal (m^3)	5.10^{-10}
Pas de temps (s)	$4.8 \cdot 10^{-7}$

TAB. 7.7 - Conditions limites pour la phase discrète dans le calcul diphasique réactif sur la configuration B.

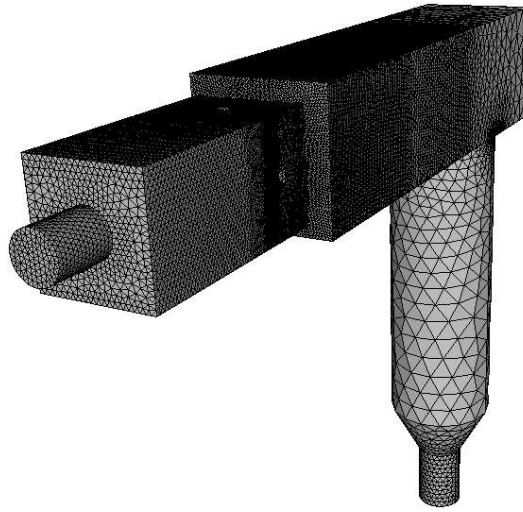


FIG. 7.41 - Vue du maillage de la configuration B.

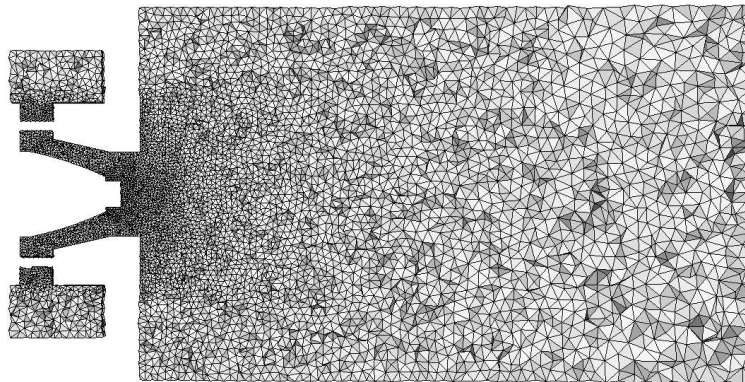


FIG. 7.42 - Coupe longitudinale du maillage de la configuration B.

7.4.4 Paramètres numériques

Dans le tableau 7.4.4, on résume les paramètres numériques utilisés pour le calcul diphasique réactif de la configuration B. Le schéma numérique est désormais le schéma TTGC. Ce choix fait suite aux conclusions de la thèse de Riber [192] qui a mis en évidence que l'erreur de dispersion, introduite par le schéma LW pour la résolution de la phase dispersée, peut menacer la stabilité du calcul et provoquer

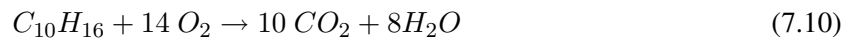
un arrêt de celui-ci, pour cause de fractions volumiques négatives, en présence de forts gradients dans la phase dispersée. La viscosité d'ordre 2 pour le gaz a été augmentée dans ce calcul, notamment à cause de la présence de la flamme. Pour la phase dispersée, on utilise le modèle de Yoshizawa pour modéliser le tenseur des contraintes de sous-maille (voir section 2.3.2). Les niveaux des coefficients pour la viscosité, pour la phase liquide, sont pris identiques à ceux de la phase gazeuse. Toutefois, comme on pouvait s'y attendre, les senseurs ζ s'activent beaucoup plus souvent et de manière plus intense pour la phase liquide du fait de l'absence de termes de pression et de diffusion (termes de sous-maille mis à part).

Paramètres	Choix / Valeurs
Schéma de convection	TTGC <i>cell-vertex</i> (sec. 4.4) (CFL) : $\nu = 0.7$
Schéma de diffusion	Opérateur 2Δ (sec. 4.8)
Modèle de sous-maille (gaz)	Smagorinsky (sec. 2.2.3) $C_S = 0.18$
Modèle de sous-maille (liquide)	Yoshizawa (sec. 2.3.2) $C_{p,Y} = 0.116$ et $C_{p,S} = 0.16$
Modèle de viscosité artificielle (gaz)	Modèle de Colin sec4.11) $\epsilon^{(2)} = 0.1$ $\epsilon^{(4)} = 0.05$
Modèle de viscosité artificielle (liquide)	Modèle de Riber sec4.11) $\epsilon_p^{(2)} = 0.1$ $\epsilon_p^{(4)} = 0.05$

TAB. 7.8 - Paramètres numériques du calcul monophasique sur la configuration A

7.4.5 Chimie PEA

Le carburant utilisé dans ce calcul est le JP10, dont le nom exact est *exo-tétrahydrodicyclopentadiène*. Sa formule brute est $C_{10}H_{16}$ et ses caractéristiques thermodynamiques sont rassemblées dans le tableau 7.4.5. La combustion de ce composé [128] fait intervenir un très grand nombre de réactions (174) et d'espèces chimiques (36). Il est évidemment impossible de considérer le schéma cinétique complet, pour des raisons de coût de calcul prohibitif. Les mécanismes chimiques sont donc modélisés, dans le calcul, par l'équation bilan globale de combustion suivante :



La richesse ϕ d'un mélange contenant dioxygène et JP10 est donnée par :

$$\phi = s \frac{Y_{JP10}}{Y_{O_2}} \quad (7.11)$$

Le rapport stoechiométrique de masse s , permettant de calculer la richesse, vaut :

$$s = \frac{\nu'_{O_2} W_{O_2}}{\nu'_{JP10} W_{JP10}} = 3.288 \quad (7.12)$$

Paramètres	Valeurs
Masse volumique ρ_p	783 kg/m ³
Température d'ébullition à pression ambiante T_{sat}	461.23 K
Température de Clausius-Clapeyron T_{CC}	393.85 K
Pression de Clausius-Clapeyron p_{CC}	15870 Pa
Enthalpie latente d'évaporation L_v	305 kJ/mol
Capacité calorifique à pression constante $C_{p,l}$	2100 kJ/mol

TAB. 7.9 - Caractéristiques du JP10 liquide [41, 79]

Au final, il ne reste plus que 5 espèces. Les 4 apparaissant dans l'équation (7.10) ainsi que le diazote N_2 , considéré ici comme un scalaire passif. Le taux d'avancement $\mathcal{Q}$ de cette réaction est calculé suivant la loi d'Arrhénius :

$$\mathcal{Q} = AT^\beta \left(\frac{\rho Y_{JP10}}{W_{JP10}} \right)^{n_{JP10}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^{n_{O_2}} \exp \left(-\frac{T_a}{T} \right) \quad (7.13)$$

où A est la constante pré-exponentielle, β est l'exposant de température (supposé nul ici), Y_{JP10} et Y_{O_2} sont les fractions massiques de JP10 et de dioxygène, n_{JP10} et n_{O_2} sont des exposants de la réaction et T_a est la température d'activation. Leurs valeurs (tableau 7.4.5) sont optimisées, afin que le schéma cinétique global puisse reproduire, au mieux, le schéma complet sur un cas de flamme monodimensionnelle laminaire et prémélangée, lorsque la richesse varie (la plage étudiée ici est : $0,5 \leq \phi \leq 4$).

Les grandeurs plus caractéristiques de la flamme laminaire prémélangée sont sa vitesse S_L , son épaisseur δ_L^0 et la température adiabatique de fin de combustion T_b . Dans le cas d'un schéma cinétique à 1 étape, l'épaisseur thermique de flamme δ_L^0 est directement liée à la vitesse de propagation : $\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L}$. Il reste donc deux valeurs à étudier : S_L et T_b . A l'aide du logiciel COSILAB, S_L et T_b sont déterminées pour les schémas complet et global (tableau 7.4.5 - [128]).

Paramètres	Valeurs
A	$5.736 \cdot 10^{13} \text{ cal/mol}$
n_{JP10}	1.153923
n_{O_2}	0.7382
T_a	3511 K
β	0

TAB. 7.10 - Constantes intervenant dans le taux d'avancement de la réaction globale de combustion du JP10.

Les figures 7.43 et 7.44 mettent en évidence le défaut classique des schémas à 1 étape : passé une certaine richesse (ici, environ 1 pour la vitesse de flamme et 0,7 pour la température), les erreurs, par rapport au schéma global, sont très conséquentes. On précise ici que les calculs dans AVBP sont faits avec des nombres de Schmidt égaux, ce qui explique la différence sensible par rapport à COSILAB. Il est possible, toutefois, de compenser les erreurs faites par le schéma cinétique global sur la vitesse de flamme, en modifiant la constante pré-exponentielle et la faisant varier en fonction de la richesse locale du mélange. Cette méthode est nommée PEA (pré-exponentielle ajustée) et a déjà été utilisée avec succès [123]. Afin de pouvoir réaliser cette nouvelle loi d'Arrhénius (avec $A = A(\phi)$), un certain nombre d'hypothèses doit être fait et notamment que tous les nombres de Schmidt soient égaux (afin de pouvoir écrire un scalaire passif Z et de définir localement la richesse à partir de la fraction de mélange z). Ainsi

la fonction $A(\phi)$ définie par :

$$A(\phi) = Af(\phi) = 0.5 \left(1 + \tanh \left(\frac{0.15 - \phi}{2.8} \right) \right) + 0.575 \left(1 + \tanh \left(\frac{\phi - 0.4}{0.28} \right) \right) \left(1 + \tanh \left(\frac{1.45 - \phi}{0.3} \right) \right),$$

permet d'ajuster la vitesse de flamme sur le schéma cinétique complet. Les figures 7.43 et 7.44 montrent, en effet, que la méthode PEA, utilisée sur le schéma global dans AVBP, permet d'obtenir un excellent accord avec le schéma cinétique complet pour les vitesses de flamme. En revanche, les températures adiabatiques de fin de combustion restent inchangées et trop élevées, par rapport au schéma cinétique complet d'environ 200 K à la stoechiométrie. C'est la chimie PEA qui est utilisée ici malgré cet écart.

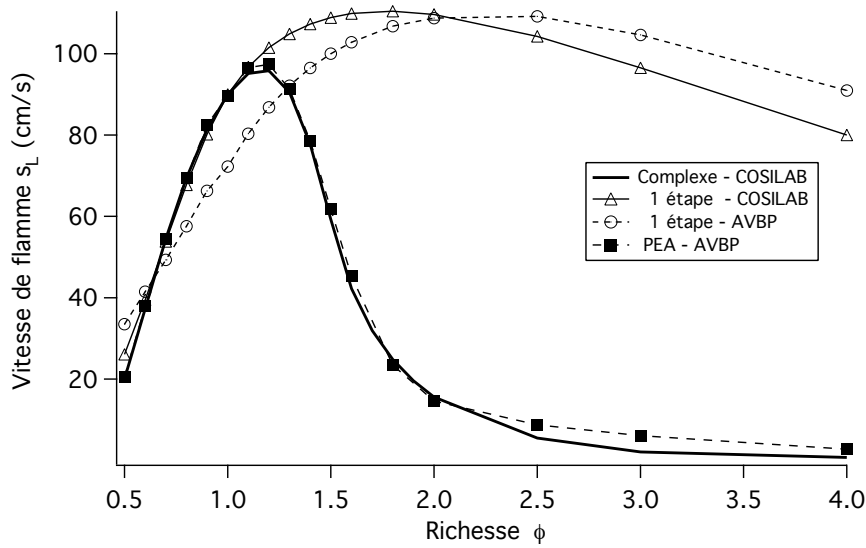


FIG. 7.43 - Vitesses de flamme laminaire en fonction de la richesse pour différents schémas cinétiques

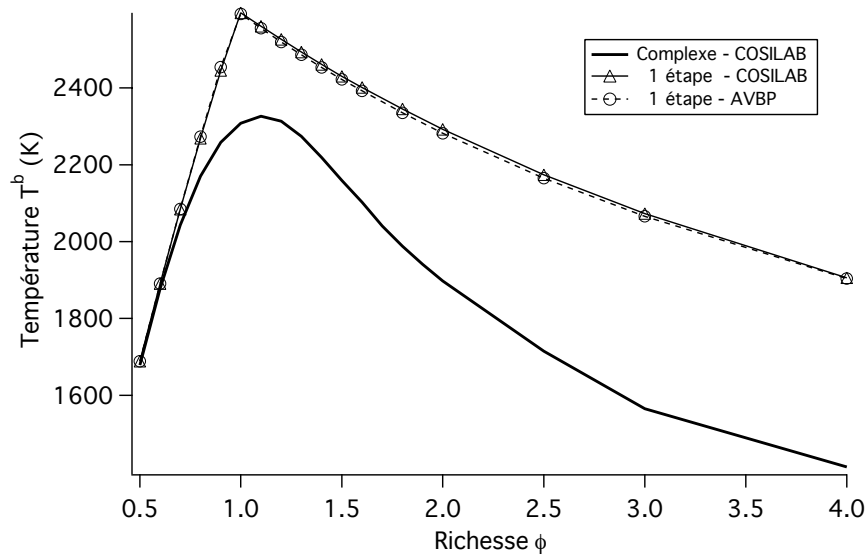


FIG. 7.44 - Températures adiabatiques de fin de combustion en fonction de la richesse pour différents schémas cinétiques. NB : les températures adiabatiques de fin de combustion avec la chimie PEA sont les mêmes qu'avec le schéma global à 1 étape - AVBP.

7.4.6 Grandeurs caractéristiques de l'écoulement

Ce paragraphe rassemble des données et des grandeurs caractéristiques de l'écoulement diphasique réactif.

- Le temps convectif est évalué de la même façon que pour l'écoulement à froid monophasique, on a donc :

$$\tau_{conv} = \frac{m_{tot}}{\dot{m}} = \frac{4.78}{28.9} = 0.165 \text{ s} \quad (7.14)$$

- Le temps de Swirl représente approximativement le temps que met l'écoulement vrillé à faire un tour. On l'estime en sortie d'injecteur à :

$$\tau_{swirl} = \frac{\pi d_{recirc}}{u_\theta} \simeq \frac{1.45 \cdot 10^{-3} \pi}{30} \simeq 1.5 \cdot 10^{-3} \text{ s} \quad (7.15)$$

- Le temps caractéristique de relaxation des gouttes est donné par :

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_{p,0}^2}{18\mu} = \frac{796 \cdot 40 \cdot 10^{-6}}{18 \cdot 1.788 \cdot 10^{-5}} = 3.957 \cdot 10^{-3} \text{ s} \quad (7.16)$$

- On en déduit alors un nombre de Stokes au niveau de l'atomiseur :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_{swirl}} = 2.606 \quad (7.17)$$

Ce qui permet de dire que les particules en sortie d'injecteur sont inertielles et relativement peu influencées par l'écoulement gazeux (du moins avant le début de l'évaporation).

- Le nombre de Reynolds, toujours en sortie d'injecteur, s'écrit :

$$Re = \frac{u_{deb} d_{inj}}{\nu} \simeq \frac{29.5 \times 29 \cdot 10^{-3}}{1.5 \cdot 10^{-5}} \simeq 57000 \quad (7.18)$$

- La richesse globale est égale à :

$$\phi_{globale} = s \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_O} = 3.288 \times \frac{2.9}{0.23 \times 26} = 1.59 \quad (7.19)$$

7.4.7 Structure de l'écoulement

Champs de vitesses moyennes - phase porteuse

On présente, dans un premier temps, la structure de l'écoulement moyen de la phase porteuse. Toutes les moyennes présentées dans la suite (pour le gaz et le liquide) sont réalisées sur un temps $T_m = 115 \text{ ms}$. Les figures 7.45, 7.46 et 7.47 présentent les différentes composantes de la vitesse moyenne. Globalement, la structure de l'écoulement reste assez proche de celle présentée pour la configuration A. On observe la présence de la zone de recirculation centrale (CTRZ), ainsi que la zone de recirculation dans les coins. La majeure partie du débit contourne, là aussi, la CTRZ. La comparaison est possible avec le calcul précédent car les débits, bien que différents, ont été adaptés en fonction de la température de l'air injecté, afin d'avoir des champs de vitesse d'amplitude similaire. Ainsi, on peut pointer quelques différences avec les champs moyens dans le calcul monophasique non réactif (Figures 7.17, 7.18 et 7.19) :

- Les maxima de la vitesse axiale sont plus importants pour le calcul réactif. Ainsi, le jet est encore plus rapide qu'à froid et la partie proche injecteur de la zone de recirculation voit des vitesses plus grandes.
- L'angle d'ouverture du jet est plus important dans ce calcul réactif et l'extension du jet se fait de manière plus régulière ici (et non pas en deux temps comme précédemment).
- La forme de la zone de recirculation est, de la même manière, légèrement modifiée. L'ouverture plus importante et régulière du jet se traduit aussi par une forme de bouteille (*bottle neck*) moins prononcée de la CTRZ.

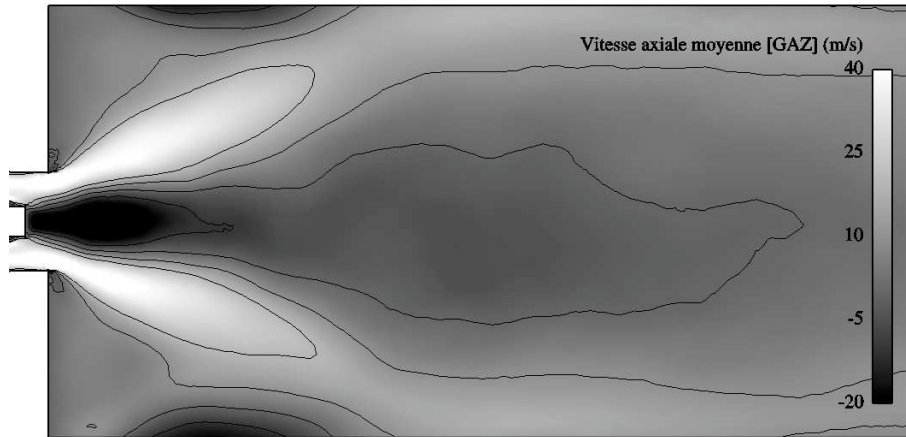


FIG. 7.45 - Champ de vitesse moyenne axiale de la phase porteuse pour le calcul réactif. Coupe longitudinale en $x = 0 \text{ mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\langle u_z \rangle$ dont les valeurs sont comprises entre -20 et 20 m/s.

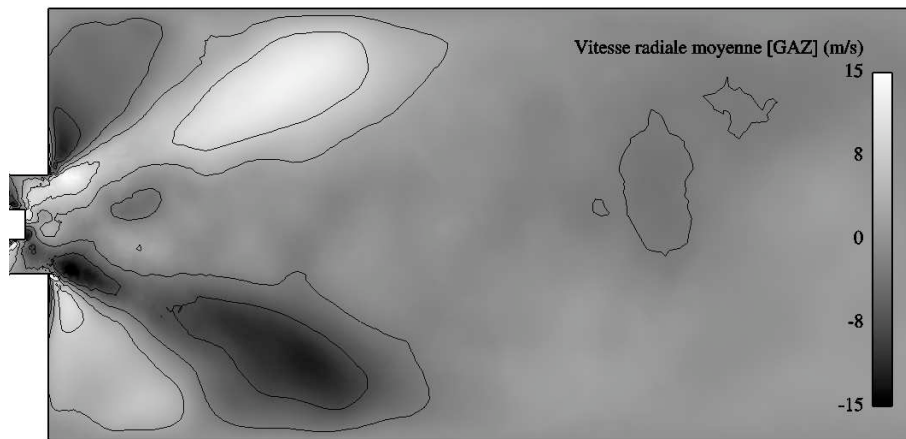


FIG. 7.46 - Champ de vitesse moyenne radiale de la phase porteuse pour le calcul réactif. Coupe longitudinale en $x = 0 \text{ mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\langle u_r \rangle$ dont les valeurs sont comprises entre -8 et 8 m/s.

Champs de vitesses moyennes - phase dispersée

Analyse qualitative Les figures 7.59, 7.49 et 7.50 illustrent les composantes de la vitesse moyenne de la phase dispersée. Le spray a la forme attendue en cône creux. Le champ de vitesse axiale de la phase dispersée présente des similitudes avec la phase gazeuse. On retrouve, par exemple, des zones

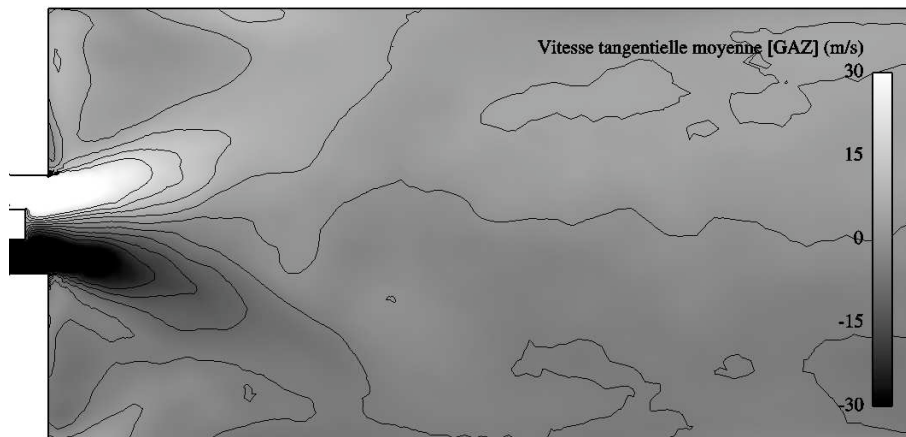


FIG. 7.47 - Champ de vitesse moyenne tangentielle de la phase porteuse pour le calcul réactif. Coupe longitudinale en $x = 0\text{mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\langle u_\theta \rangle$ dont les valeurs sont comprises entre -20 et 20 m/s.

de recirculations dans les coins et une zone de recirculation centrale, bien que cette dernière soit très différente de celle du gaz (la zone de vitesses négatives est très en aval). Il existe cependant aussi des différences marquées. On va le voir plus loin, le jet correspond sur les champs de vitesse qu'on montre ici aux zones de fortes vitesses. A ce titre, on ne va commenter que cette zone. Le comportement le plus frappant, et qu'on n'observait pas sur le calcul diphasique non réactif (qu'on ne présente pas dans cette thèse), est l'accélération des particules (qu'on voit sur le champ axial, figure 7.59) à environ 1 diamètre d'injecteur en aval de l'atomiseur. Ce phénomène est dû à l'évaporation et la traînée. La première allège petit à petit les particules (transfert de masse du liquide vers le gaz), qui voient ainsi leur inertie diminuer (le nombre de Stokes est de plus en plus faible). Or, les vitesses de la phase porteuse sont encore très importantes et supérieures à celle des gouttes. De ce fait, via la traînée, les particules de fuel sont accélérées par le fluide porteur, peu de temps avant d'atteindre la flamme. Ce gain de quantité de mouvement est surtout sensible sur la composante axiale de la vitesse, mais on peut aussi l'observer sur les autres composantes.

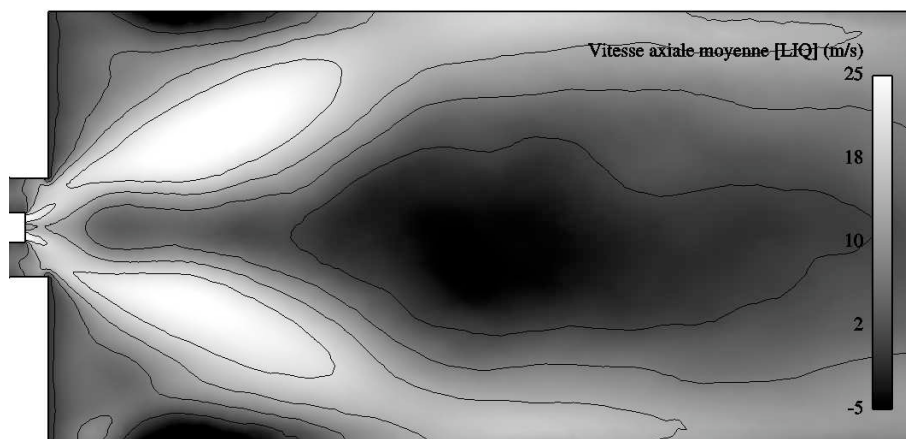


FIG. 7.48 - Champ de vitesse moyenne axiale de la phase dispersée pour le calcul réactif. Coupe longitudinale en $x = 0\text{mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\langle u_{p,z} \rangle$ dont les valeurs sont comprises entre -5 et 20 m/s.

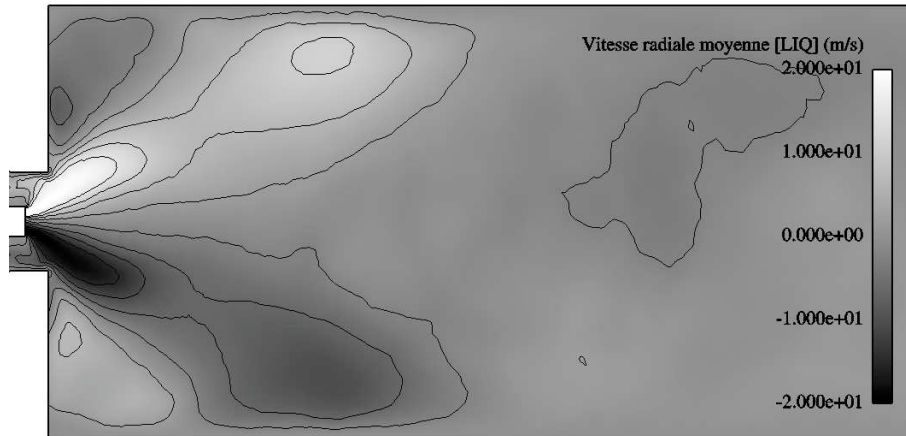


FIG. 7.49 - Champ de vitesse moyenne axiale de la phase dispersée pour le calcul réactif. Coupe longitudinale en $x = 0\text{ mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\langle u_{p,r} \rangle$ dont les valeurs sont comprises entre -15 et 15 m/s.

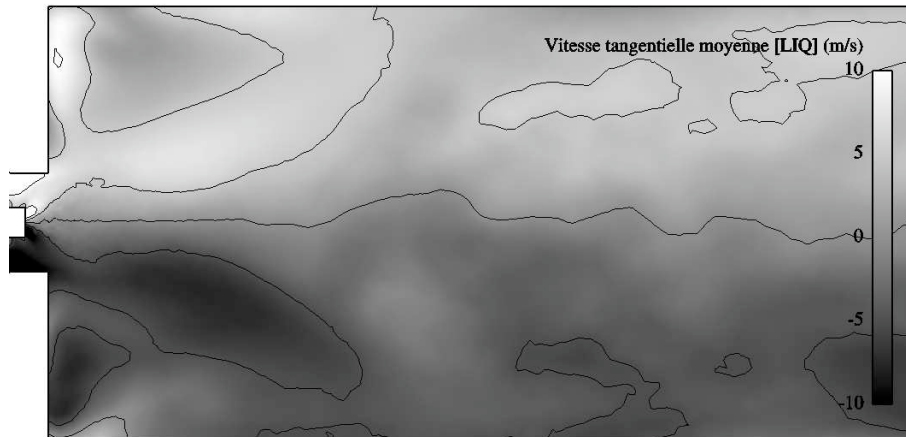


FIG. 7.50 - Champ de vitesse moyenne axiale de la phase dispersée pour le calcul réactif. Coupe longitudinale en $x = 0\text{ mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\langle u_{p,\theta} \rangle$ dont les valeurs sont comprises entre -10 et 10 m/s.

Analyse quantitative Les mesures faites à l'ONERA, en utilisant la PIV, permettent de faire des comparaisons sur les champs de vitesse moyenne de la phase dispersée. Les profils de vitesse de référence, provenant de l'expérience, sont construits à partir de champs PIV, obtenus par l'ONERA, dans la coupe longitudinale utilisée jusqu'ici pour présenter les résultats. Les données fournies par la PIV ne prennent pas en compte la taille des gouttes. On peut donc en conclure que les vitesses obtenues de cette manière correspondent à des moyennes au cours du temps et sur l'ensemble des classes de gouttes⁷. Elles sont donc comparables aux vitesses prévues par l'approche Euler-Euler. Les figures 7.51 à 7.53 présentent une comparaison pour la vitesse moyenne axiale. On peut noter que les résultats fournis par la LES concordent avec les données de l'ONERA. Mis à part dans la zone la plus proche de l'atomiseur, on retrouve la bonne ouverture du jet, ainsi que les mêmes niveaux.

Les figures 7.54 à 7.56 fournissent les mêmes comparaisons pour la composante radiale. Celles-ci permettent de faire les mêmes conclusions. Les différences les plus marquées se situent en proche sortie

⁷On peut penser toutefois que la technique de mesure favorise surtout la détection des plus grosses gouttes, ajoutant certainement un biais en faveur de celles-ci.

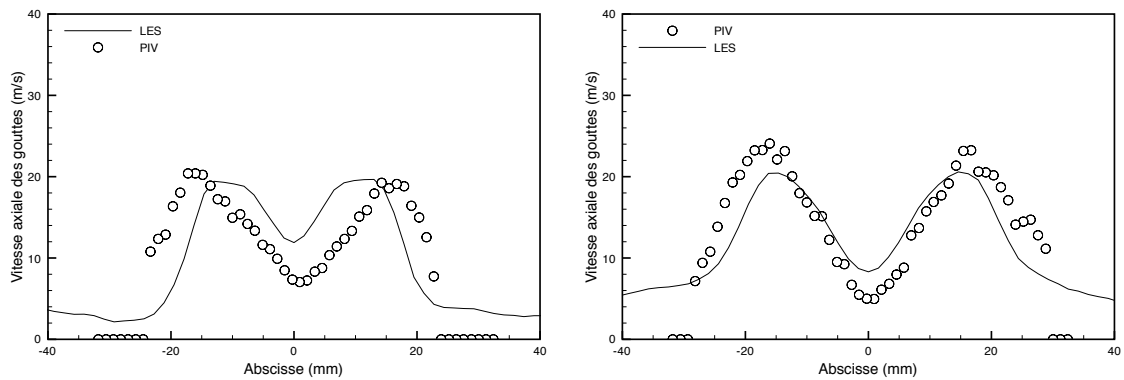


FIG. 7.51 - Profils de vitesse moyenne axiale de la phase dispersée. Comparaisons entre résultats expérimentaux et LES pour des abscisses correspondant à gauche à 5 mm et à droite à 10 mm du fond de chambre.

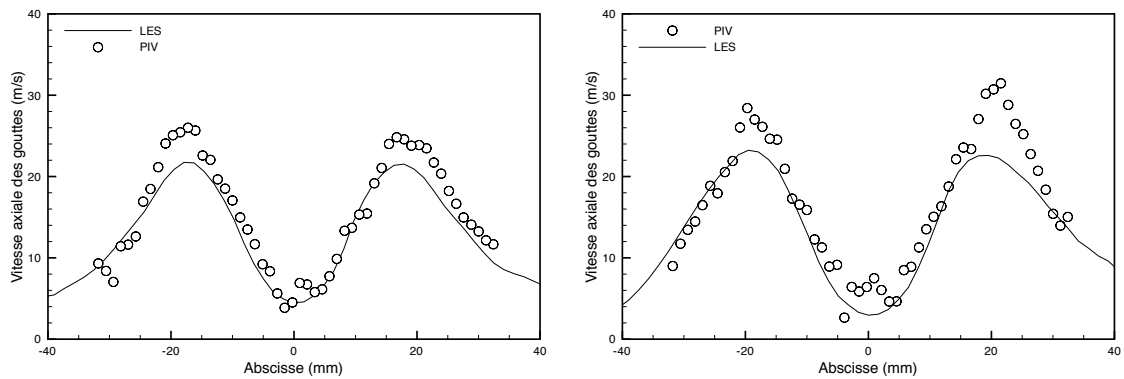


FIG. 7.52 - Profils de vitesse moyenne axiale de la phase dispersée. Comparaisons entre résultats expérimentaux et LES pour des abscisses correspondant à gauche à 15 mm et à droite à 20 mm du fond de chambre.

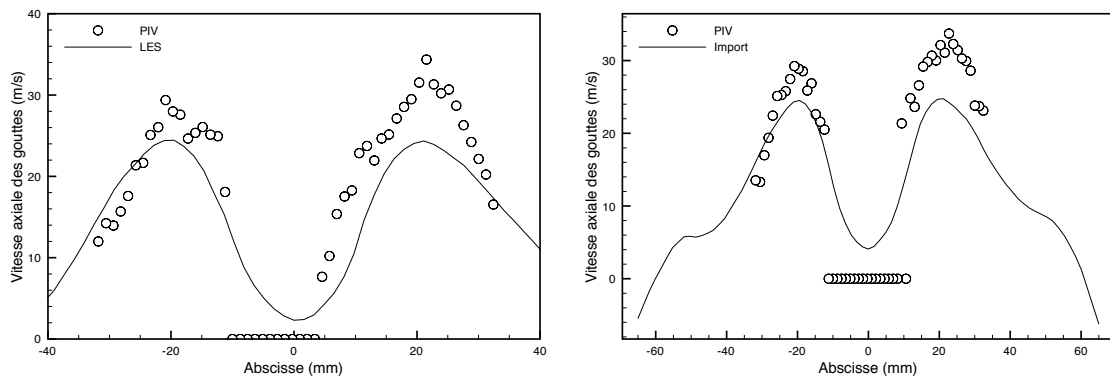


FIG. 7.53 - Profils de vitesse moyenne axiale de la phase dispersée. Comparaisons entre résultats expérimentaux et LES pour des abscisses correspondant à gauche à 25 mm et à droite à 30 mm du fond de chambre.

de l'injecteur. Les niveaux sont les bons, en revanche, l'ouverture est moins prononcée dans le calcul. Plus en aval, la traînée aidant (les gouttes ne sont pas des traceurs car $St > 1$, mais elles subissent, tout de même, l'influence de la traînée, d'autant que le gaz est très rapide en sortie d'injecteur), expérience

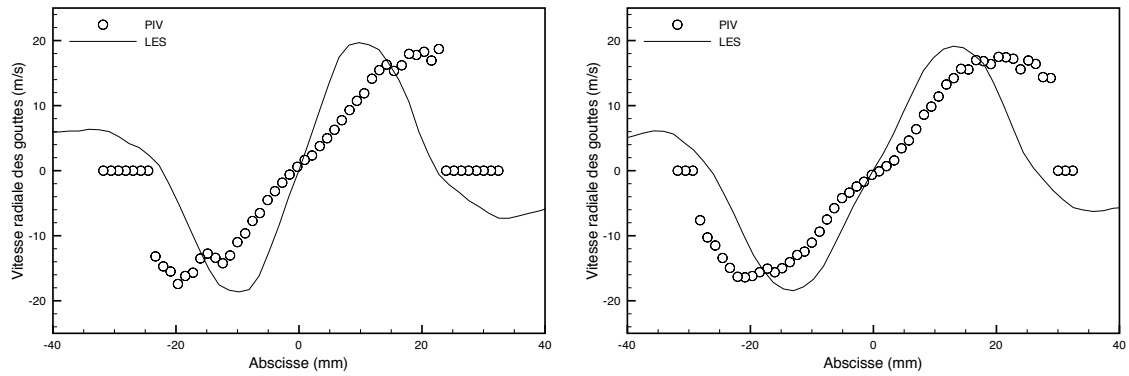


FIG. 7.54 - Profils de vitesse moyenne radiale de la phase dispersée. Comparaisons entre résultats expérimentaux et LES pour des abscisses correspondant à gauche à 5 mm et à droite à 10 mm du fond de chambre.

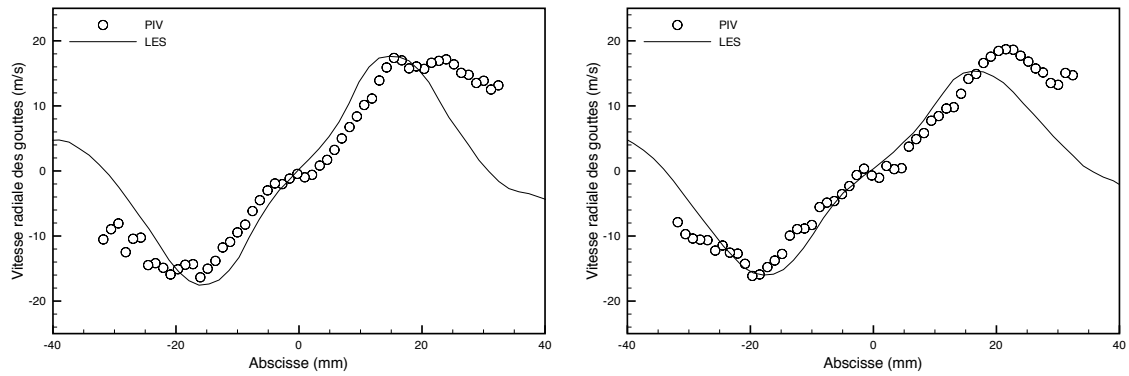


FIG. 7.55 - Profils de vitesse moyenne radiale de la phase dispersée. Comparaisons entre résultats expérimentaux et LES pour des abscisses correspondant à gauche à 15 mm et à droite à 20 mm du fond de chambre.

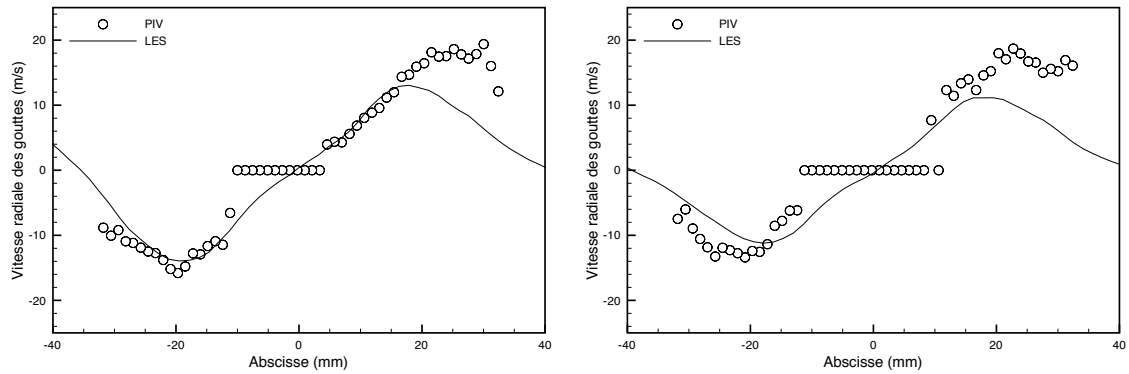


FIG. 7.56 - Profils de vitesse moyenne radiale de la phase dispersée. Comparaisons entre résultats expérimentaux et LES pour des abscisses correspondant à gauche à 25 mm et à droite à 30 mm du fond de chambre.

et calcul sont en très bon accord.

Ces profils permettent non seulement de confirmer la capacité de la méthode Eulérienne employée à

décrire les propriétés principales d'un spray, mais aussi de valider la stratégie employée pour modéliser l'injection de liquide. Il est aussi étonnant de voir que la méthode Euler-Euler, n'utilisant qu'une taille moyenne de gouttes (ici $40\mu m$), parvienne à reproduire aussi bien le champ de vitesse moyenne observée expérimentalement.

Partie fluctuante et champs de vitesses instantanées - phase porteuse

Les formes des champs de vitesses fluctuantes ont peu changé par rapport au cas monophasique non réactif (figure 7.57). En revanche, les niveaux sont plus élevés, l'activité turbulente est plus importante, ce qu'on pouvait attendre, vu que le nombre de Reynolds a fortement augmenté. Cette remarque est confirmée par le champ de vitesse axiale instantanée présenté sur la figure 7.59. Celui-ci présente plus de fines structures. On note que le jet est plus ouvert et la zone de recirculation centrale plus importante que dans le cas non réactif.

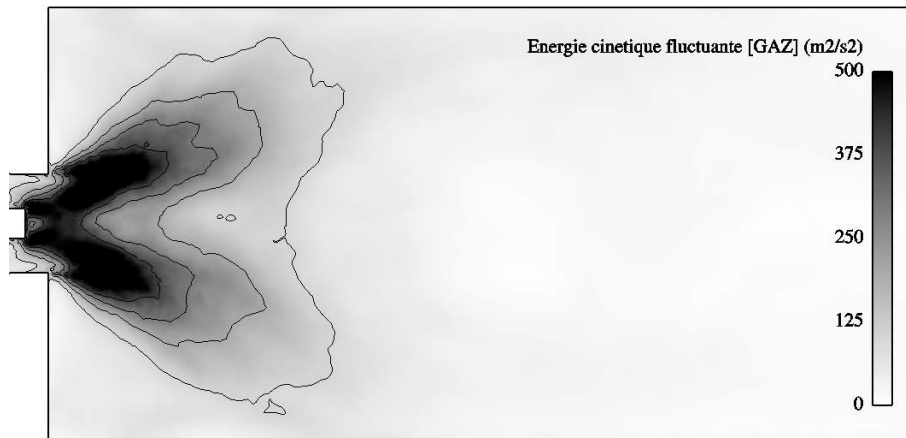


FIG. 7.57 - Champ de vitesse moyenne fluctuante de la phase porteuse pour le calcul réactif. Coupe longitudinale en $x = 0mm$. Les lignes noires sont des iso-contours de $\frac{1}{2}u_k^{RMS}u_k^{RMS}$ dont les valeurs varient entre 0 et 400 m^2/s^2 .

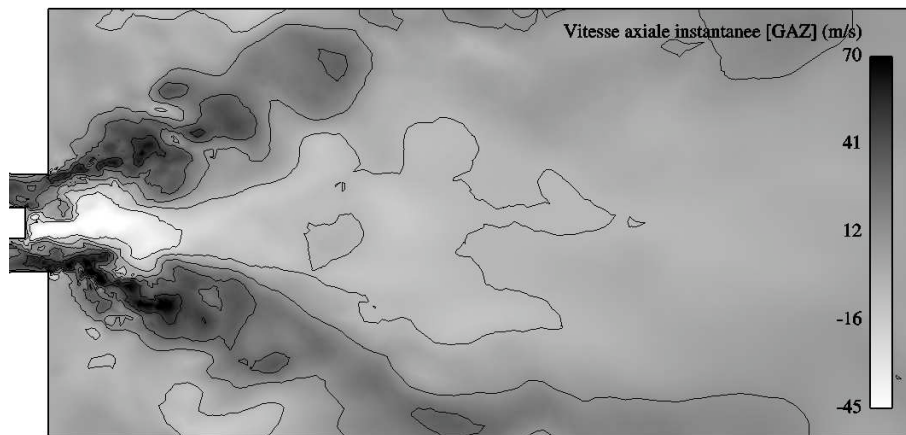


FIG. 7.58 - Champ de vitesse axiale instantanée du gaz pour le calcul réactif. Coupe longitudinale en $x = 0mm$. Les lignes noires sont des iso-contours de u_z dont les valeurs sont comprises entre -30 et 60 m/s .

Champs des vitesses instantanées - phase dispersée

Le champ de vitesse instantanée du liquide est très proche du champ moyen. On retrouve les mêmes caractéristiques principales (jet ouvert, zones de recirculation centrale et dans les coins). On constate que l'ouverture du spray liquide est assez similaire au jet gazeux. De plus, comme on l'avait souligné sur le champ moyen, on note que les particules accélèrent à mesure qu'elles s'éloignent de l'atomiseur, ce qui est probablement dû à l'impulsion fournie par le gaz (traînée), d'autant plus importante que les gouttes s'évaporent et donc sont moins inertielles. Par ailleurs, le jet se déstabilise et la zone de vitesses axiales importantes s'élargit à partir de $z = 1d_{inj}$ et on observe la présence de paquets de vitesse axiale, tantôt plus rapides, tantôt plus lents.

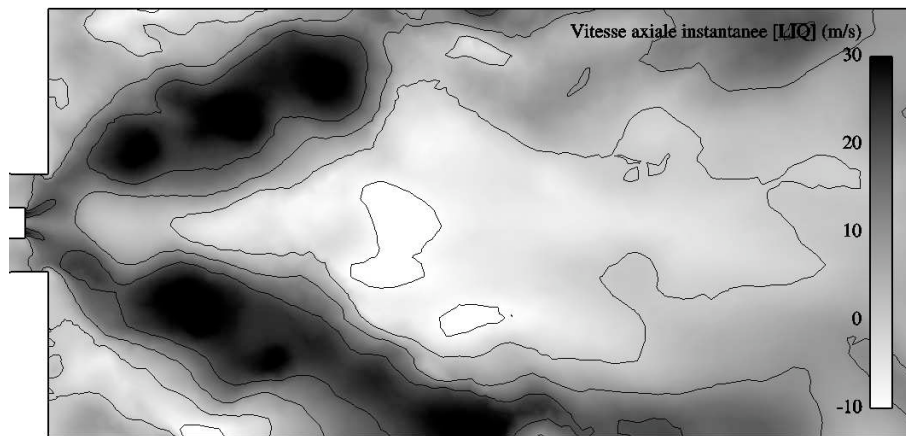


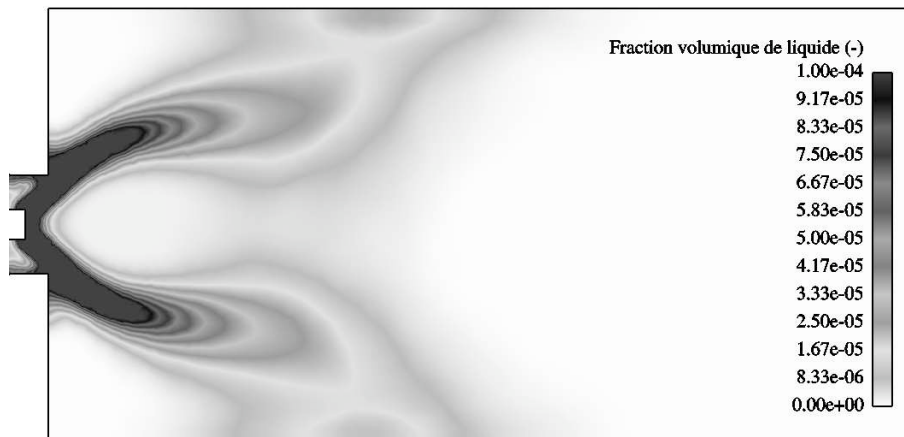
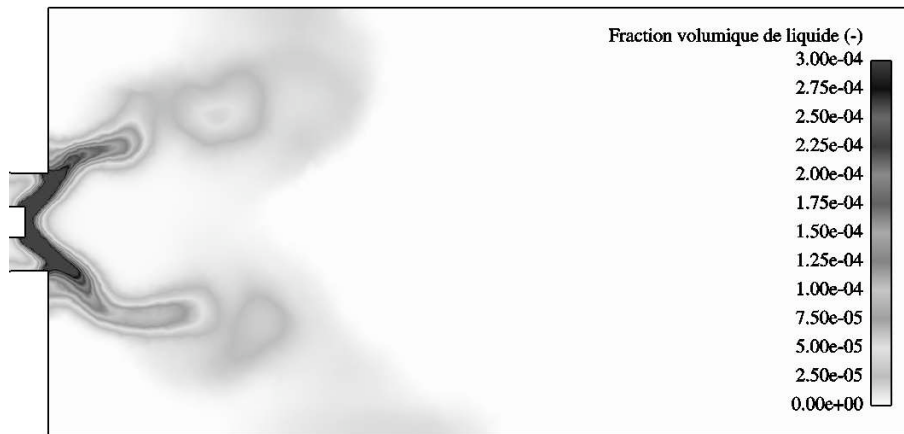
FIG. 7.59 - Champ de vitesse axiale instantanée des gouttes pour le calcul réactif. Coupe longitudinale en $x = 0\text{ mm}$. Les lignes noires sont des iso-contours de $u_{p,z}$ dont les valeurs sont comprises entre -10 et 30 m/s.

7.4.8 Dispersion du carburant - Températures

On montre la répartition des gouttes dans la chambre sur la figure 7.60. On retrouve la forme de spray conique qu'on attendait, ce qui confirme la remarque faite précédemment sur les champs de vitesse de la phase dispersée. A la vue de la répartition des gouttes, et en s'appuyant sur les champs de vitesse, on en déduit que les gouttes suivent une trajectoire hélicoïdale, s'appuyant sur la zone conique riche en gouttes, illustrée figure 7.60.

On remarque qu'il n'y a pas de gouttes dans les zones de recirculation. Cette absence est indirectement due à l'évaporation. En effet, les zones de recirculation, on le verra plus loin, sont principalement composées de produits de combustion et de fuel évaporé très chauds. La diminution de $\langle \alpha_p \rangle$ en s'éloignant de l'atomiseur provient de la dispersion des gouttes, comme on peut le voir sur la figure 7.61. Assez faible jusqu'à $z = 1d_{inj}$, elle finit, ensuite, par être sensible lorsque le jet commence à osciller. En moyenne (figure 7.60), on observe automatiquement une diminution de $\langle \alpha_p \rangle$.

La température des gouttes et du gaz sont de 285K en entrée. Le jet gazeux est chauffé par les zones de recirculation (figure 7.62), puis transmet sa chaleur aux gouttes. Le chauffage prend néanmoins un certain temps (figure 7.63), dans la mesure où le gaz n'est pas immédiatement chaud (la convection est très importante car les vitesses du jet sont élevées). A une température aux alentours de 300K et à la pression atmosphérique, l'évaporation des gouttes de fuel est très lente (voire négligeable), comme le montre la figure 7.65, qui donne l'évolution de la taille d'une goutte dans un environnement chaud au repos, en

FIG. 7.60 - *Champ de fraction volumique moyenne de liquide dans le calcul réactif.*FIG. 7.61 - *Champ de fraction volumique instantanée de liquide dans le calcul réactif.*

employant les hypothèses habituelles de sphéricité et de régime de diffusion [115, 121]⁸. Même lorsque les gaz sont plus chauds, on note qu'il faut plusieurs millisecondes pour évaporer la goutte. Quand elles entrent dans les gaz à 2000K, compte tenu de la vitesse de la phase liquide dans le spray (aux alentours de 30 m/s), les gouttes ont le temps de parcourir encore plusieurs centimètres avant d'être évaporées (si on considère 1/2 ms, la goutte parcourt 1,5 cm). Ceci explique la raison pour laquelle le diamètre varie donc très peu jusqu'à proximité de la flamme. En traversant le front de flamme, en revanche, le gradient de température du gaz est fort et la phase porteuse atteint plus de 2000K dans la flamme. Les gouttes reçoivent donc une quantité considérable d'énergie. Elles atteignent alors la température de saturation, ce qui provoque une vaporisation bien plus rapide et donc une brusque diminution du diamètre. Ceci implique que les gouttes disparaissent juste après le front de flamme (figure 7.64).

⁸Données obtenues à l'aide du code Evap0D du CERFACS [21]

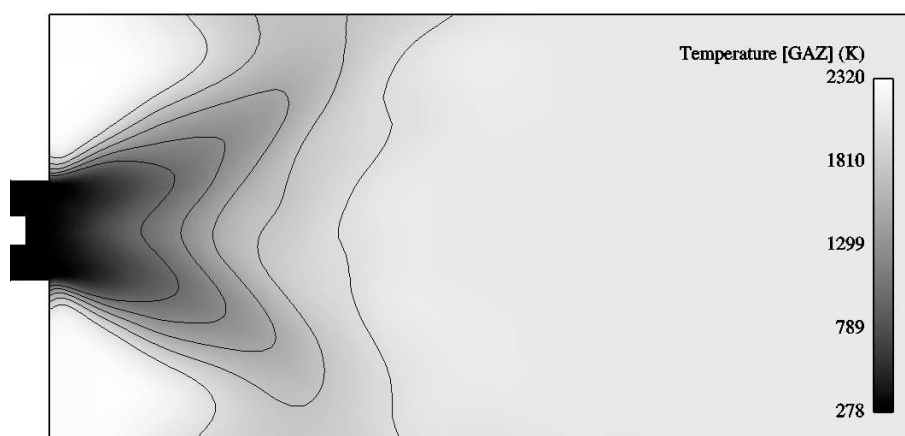


FIG. 7.62 - Champ de température moyenne du gaz dans le calcul réactif. Les iso-contours de $\langle T \rangle$ en noir varient entre 300 et 2000 K.

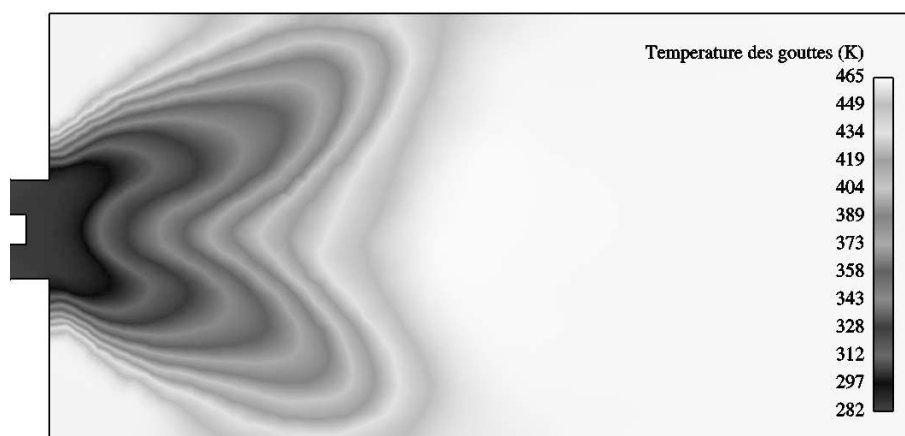


FIG. 7.63 - Champ de température moyenne des gouttes de fuel dans le calcul réactif.

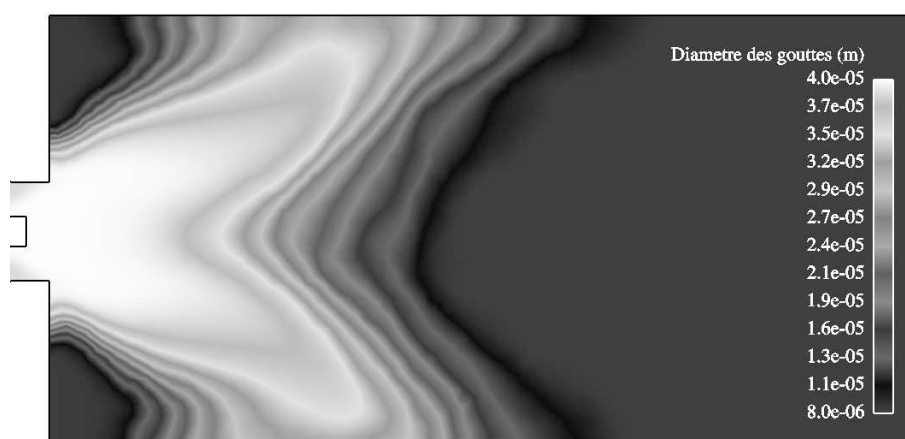


FIG. 7.64 - Champ de diamètre moyen des gouttes de fuel dans le calcul réactif.

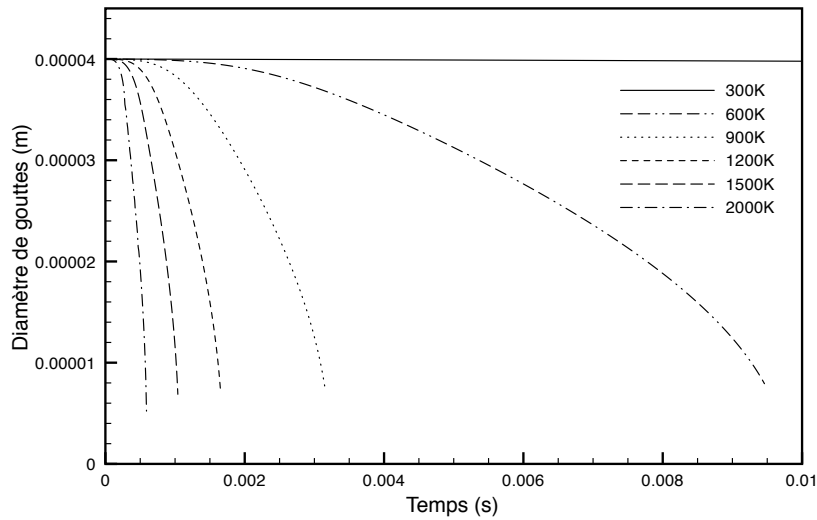


FIG. 7.65 - Variation du diamètre de gouttes de JP10 dans des gaz environnants à différentes températures.

7.4.9 Structure de flamme

Le taux de dégagement de chaleur moyen (figure 7.66) indique la présence de deux fronts de flamme. Le premier forme un cône (par symétrie de révolution) autour de la sortie de l'injecteur. Cette flamme se situe au niveau de la zone de vitesses radiales nulles des deux phases, entre le jet et les zones de recirculation des coins. Le second front se trouve, de la même manière, dans une zone de vitesses faibles, entre le jet et la zone de recirculation centrale. On retrouve donc, dans les deux cas, un front coincé entre un jet "froid" et une zone de gaz chauds recirculants. On va analyser, plus en détail, les champs instantanés afin de déterminer la nature de ces flammes et la variation des variables à travers les fronts.

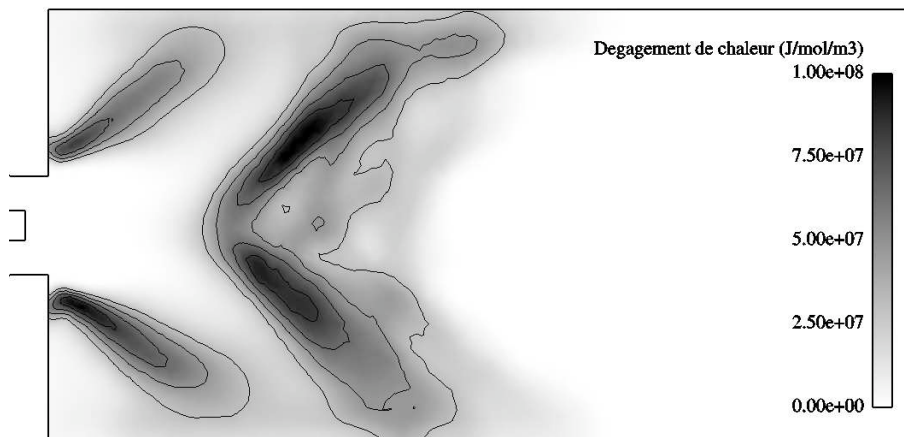


FIG. 7.66 - Taux de dégagement de chaleur moyen dans le calcul réactif.

La figure 7.67 montre un champ de taux de dégagement de chaleur sur lequel sont superposés des iso-contours de taux d'évaporation. La figure 7.68 fournit le champ d'évaporation instantané (saturé pour faire apparaître l'évaporation en amont de la flamme). Les fronts de flamme apparaissent très clairement, de part et d'autre du jet diphasique. Les iso-contours indiquent que l'évaporation se fait principalement

juste derrière les fronts de flammes, vu que les gouttes atteignent très vite la température de saturation, compte tenu de l'environnement qui les entoure. Ceci signifie que le fuel gazeux est surtout présent en aval des flammes, observées sur la figure 7.67. Or, l'oxygène provient de l'amont des flammes, ce qui laisse penser à des flammes de diffusion, ou au moins partiellement prémélangées. Le critère de Takeno permet de différencier les flammes de diffusion et de prémélange, en comparant les gradients des réactifs (O_2 et $JP10$). On peut, à partir de ce critère, définir un taux de consommation du fuel indexé $\dot{\omega}_F^*$ dont la valeur absolue est égale au taux de réaction et le signe indique s'il s'agit d'une flamme de diffusion ($\dot{\omega}_F^*$ négatif) ou d'une flamme de prémélange ($\dot{\omega}_F^*$ positif). Le taux de réaction indexé s'écrit [190] :

$$\dot{\omega}_F^* = \dot{\omega}_F \frac{\vec{\nabla} Y_F \cdot \vec{\nabla} Y_O}{\|\vec{\nabla} Y_F \cdot \vec{\nabla} Y_O\|} \quad (7.20)$$

où l'indice F indique le fuel et l'indice O indique le comburant. La figure 7.69 est une illustration de ce taux de réaction indexé. Les fronts de flamme marqués par les contours en noir correspondent à des flammes de diffusion et aux zones de forts taux de dégagement de chaleur, repérées sur la figure 7.67. A cela s'ajoute ce qui semble être une flamme de prémélange pauvre, en amont du front de flamme central (critère de Takeno positif).

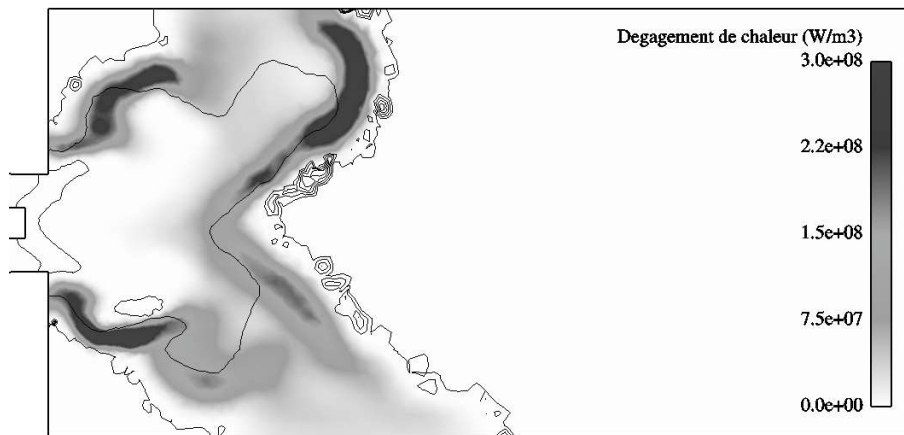


FIG. 7.67 - Taux de dégagement de chaleur instantané. Les iso-contours indiquent les zones d'évaporation.

On présente sur la figure 7.70 le champ de température instantané. Celui-ci a laissé apparaître la même structure que le champ moyen : les deux zones de coin sont remplies de gaz très chauds et la flamme, qu'on repère par le fort gradient de température, est coincée entre cette zone très chaude et le jet froid. De la même manière, on repère l'autre flamme de diffusion située entre la CTRZ et le jet. On note, en outre, que les plus hautes températures se situent juste après la flamme. Les gaz brûlés recirculants et s'échappant de la chambre sont légèrement moins chauds, du fait de la vaporisation des gouttes qui pompe une partie non négligeable de l'énergie de la phase porteuse.

Pour étudier plus en détails les variations des fractions massiques notamment (et confirmer la structure de flamme de diffusion observées grâce au critère de Takeno), on étudie leur variation le long des lignes indiquées sur la figure 7.70. Les profils A et B sont sensiblement les mêmes. Les flammes présentent toutes les deux des structures de flamme de diffusion (oxydant et carburant ont des gradients opposés, comme l'indiquait déjà le critère de Takeno). On note que dans les deux cas, le carburant est présent uniquement dans les gaz brûlés, ce qui confirme que les gouttes s'évaporent très peu dans les gaz frais.

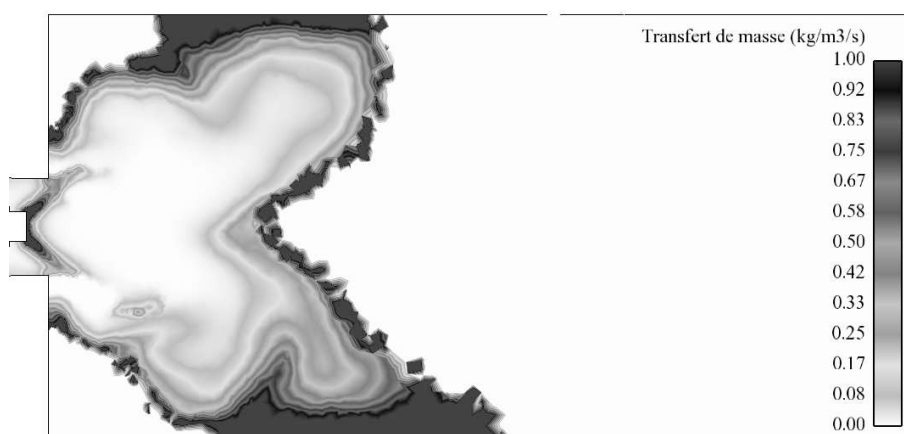


FIG. 7.68 - Taux d'évaporation instantané. L'échelle est saturée pour faire apparaître l'évaporation en amont de la flamme mais celle-ci a surtout lieu après le front de flamme.

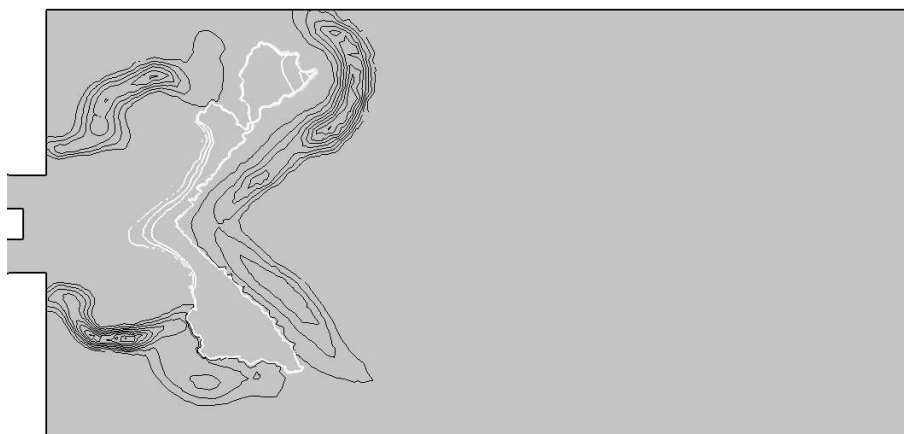


FIG. 7.69 - Taux de réaction instantané et indexé avec l'indice de Takeno. Les lignes blanches correspondent à une flamme de prémélange ($0,1 < \omega_F^* < 3$) et les noires à une flamme de diffusion ($-50 < \omega_F^* < -1$)

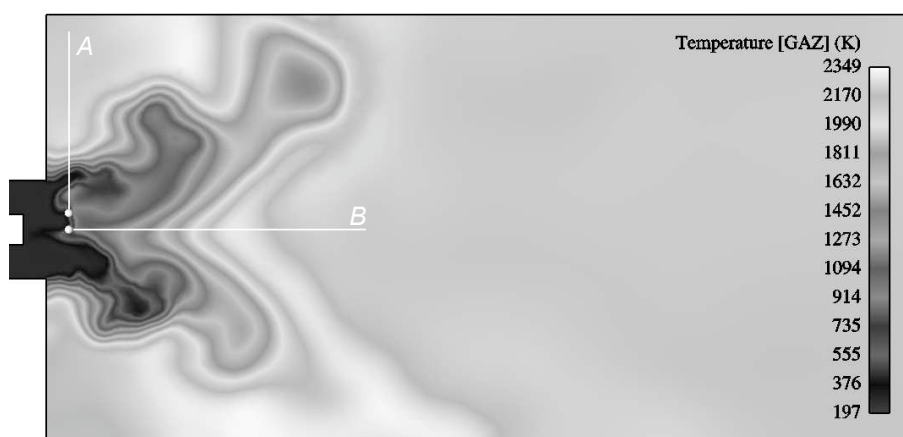


FIG. 7.70 - Champ instantané de température sur lequel figurent les profils A et B.

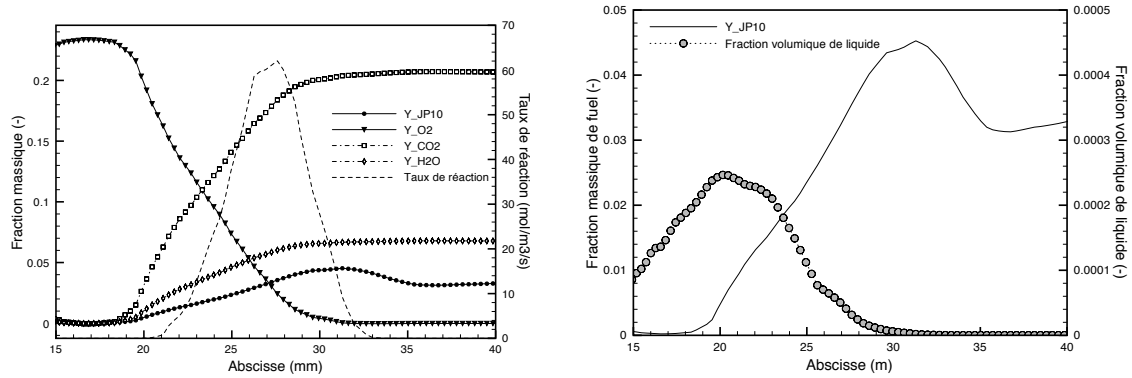


FIG. 7.71 - Variations de différentes grandeurs le long de la ligne A de la figure 7.70

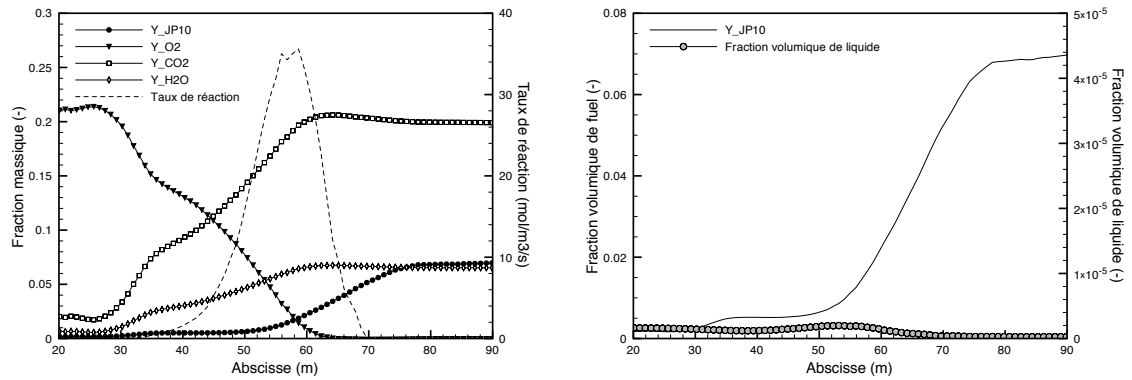


FIG. 7.72 - Variations de différentes grandeurs le long de la ligne B de la figure 7.70

On fournit enfin une description de la structure en utilisant la fraction de mélange z . Pour la définir, on introduit d'abord un scalaire passif basé sur la conservation des atomes d'oxygène :

$$Z = Y_{O_2} + \frac{W_{O_2}}{W_{CO_2}} Y_{CO_2} + \frac{\frac{1}{2}W_{O_2}}{W_{H_2O}} Y_{H_2O},$$

qu'on adimensionne de la manière suivante :

$$z(\vec{x}) = \frac{Z(\vec{x}) - Z_O}{Z_F - Z_O} = \frac{Z(\vec{x}) - Y_{O_2}^0}{-Y_{O_2, in}^0} \quad (7.21)$$

où les indices F et O correspondent aux valeurs du côté du fuel et de l'oxydant [176]. L'exposant 0 indique une valeur en entrée.

Les figures 7.73 à 7.76 confirment la structure de flamme de diffusion, décrite précédemment. Le carburant, sous forme gazeuse, se trouve principalement là où les gouttes sont à la température de saturation et se vaporisent. Or, ces zones se situent dans des gaz à très hautes températures, qui correspondent, comme on l'a vu, aux recirculations de ceux-ci. Il est intéressant de constater que, bien que carburant et air soient injectés ensemble, le retard à la vaporisation du carburant mène à une structure de flamme de diffusion. Un scénario expliquant ce point est donné dans la section suivante.

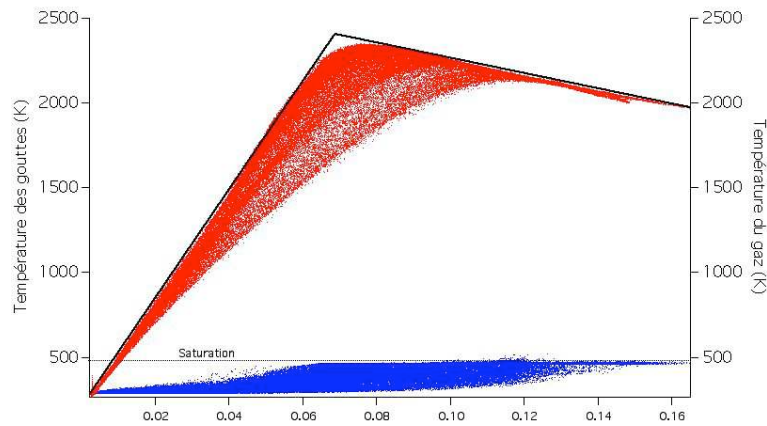


FIG. 7.73 - Diagrammes en z des températures du gaz T (en haut) et des gouttes T_p (en bas). On a indiqué la température de saturation des gouttes à 1 bar.

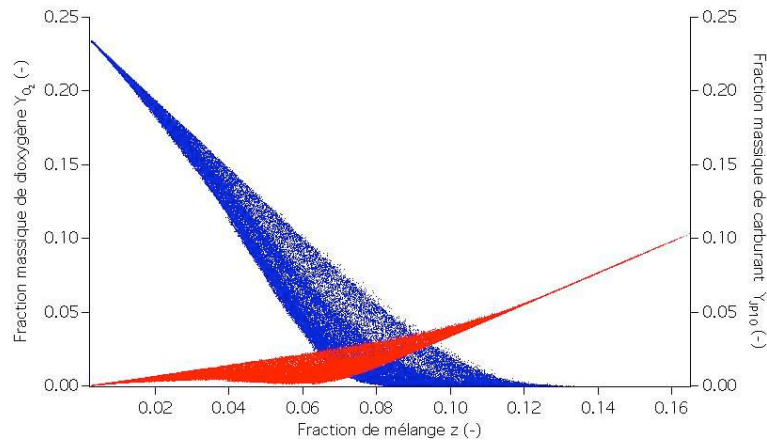


FIG. 7.74 - Diagrammes en z des fractions massiques de carburant Y_{JP10} (nulle à gauche) et d'oxydant Y_{O_2} (nulle à droite).

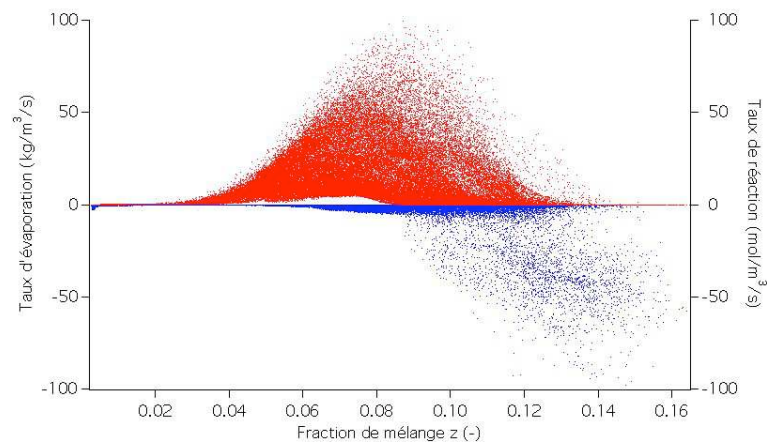


FIG. 7.75 - Diagrammes en z des taux de réaction $\dot{\omega}_F$ (valeurs positives) et du taux d'évaporation $\Gamma_{p,1}$ (valeurs négatives).

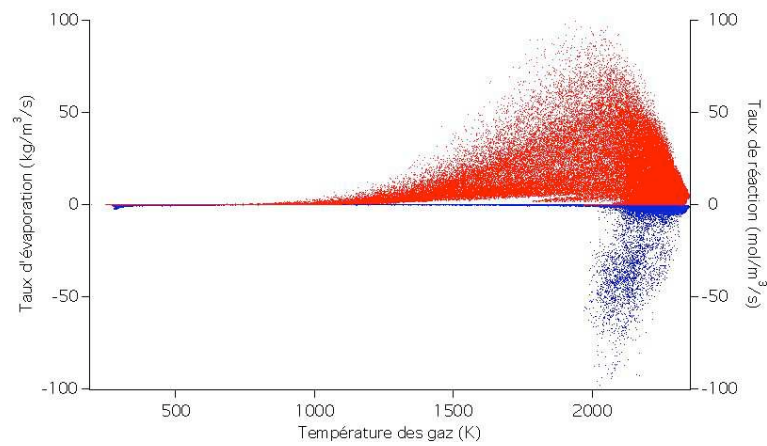


FIG. 7.76 - Taux de réaction $\dot{\omega}_F$ (valeurs positives) et d'évaporation $\Gamma_{p,1}$ (valeurs négatives) en fonction de la température de la phase porteuse.

7.4.10 Scénario de combustion

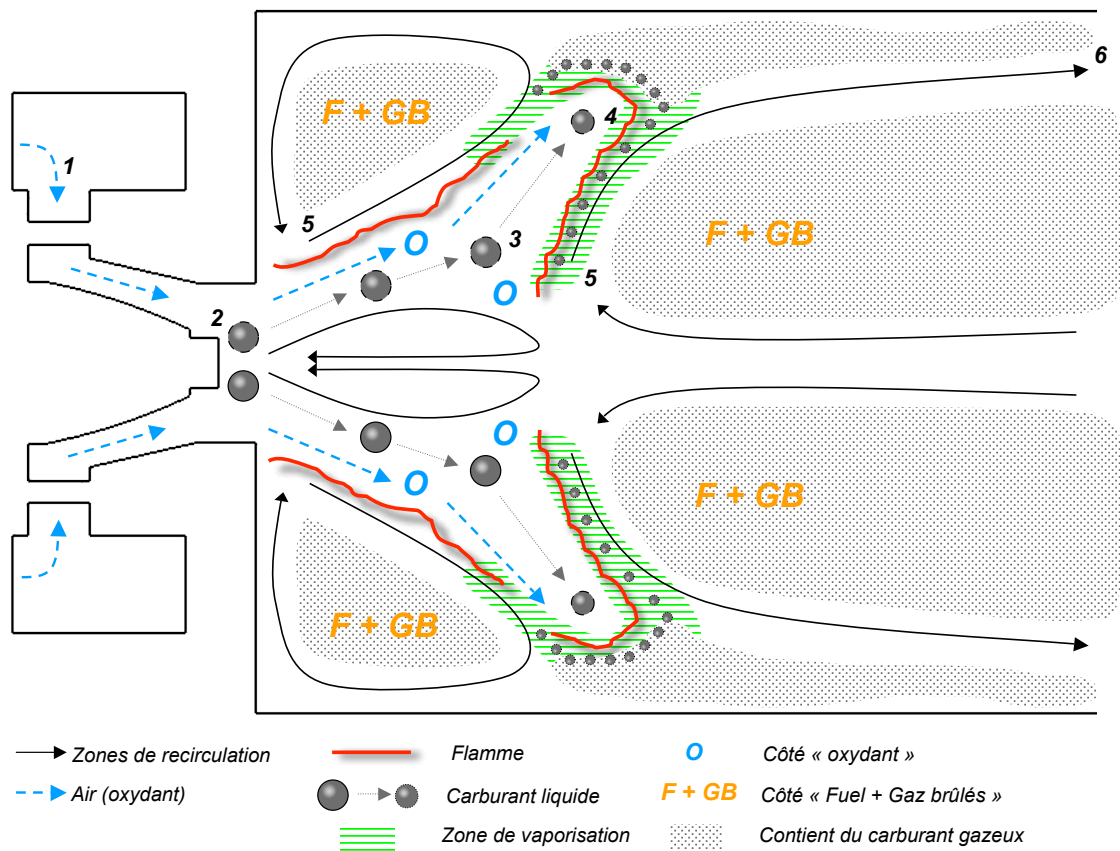


FIG. 7.77 - Présentation schématique de la combustion dans MERCATO.

On propose de résumer, étape après étape et en s'appuyant sur la figure 7.77, la combustion telle qu'elle se produit dans le calcul qu'on a présenté :

1. L'air frais (285K) constitué d'un quart d'oxydant provient du plénum, passe par les vrilles du tourbillonneur ce qui lui donne un fort mouvement de swirl.
2. Le carburant, froid également (285K), est injecté au nez du tourbillonneur. Le spray est en forme de cône creux. Le champ de vitesse du liquide est proche de celui obtenu pour le gaz. La température environnante, relativement basse, implique une évaporation très lente. On peut donc considérer qu'il n'y a pas ou très peu de carburant évaporé à cet endroit.
3. Les gouttes n'ont quasiment pas changé de diamètre mais se sont, en revanche, réchauffées car la température environnante est bien plus importante (on dépasse les 1000 K dans la phase porteuse).
4. Près de la flamme, la température atteint plus de 2000 K, les échanges thermiques sont d'autant plus importants que le diamètre des gouttes a commencé à diminuer. La température des gouttes est proche de la température d'ébullition. Juste après le front de flamme, les gouttes se vaporisent ($T_p = T_{sat}$), la quantité de carburant gazeux est importante dans les gaz chauds.
5. Le carburant gazeux évaporé est capturé par les zones de recirculation, dans lesquelles se trouvent aussi des gaz brûlés issus de la combustion. Il n'y a plus d'oxygène en aval, puisque la richesse globale est plus grande que 1. Les flammes sont stabilisées au niveau des frontières jet diphasique

/ zones de recirculation (points de stagnation). D'un côté, elles sont alimentées par l'oxydant (côté jet frais), de l'autre par le carburant gazeux très chaud (côté zone de recirculation). Les diagrammes en z font apparaître une structure de flamme de diffusion.

6. Le JP10 imbrûlé ainsi que les produits de combustion sont évacués. En réalité, le JP10 ne peut pas exister dans les gaz brûlés (qui sont à plus de 1500K). Les composants, à la sortie de la chambre, sont donc vraisemblablement des hydrocarbures imbrûlés (C_xH_y), issus de la décomposition du JP10, ainsi que des autres produits de combustion (CO_2 , H_2O ,...).

Il est important de conclure en disant que l'analyse précédente est obtenue en raisonnant sur des champs de température et de fractions massiques filtrés et que la localisation relative dans la LES des fronts de flamme et des zones d'évaporation doit être considérée avec prudence. Il est tout à fait possible que les positions réelles de ces zones soient différentes et que filtrage et épaissement faits en LES mènent à une conclusion trompeuse. La présence de gouttes, du côté des gaz brûlés, est difficile à vérifier expérimentalement et l'ONERA y travaille. Si des gouttes s'évaporent effectivement dans les gaz brûlés, leurs tailles et leurs durées de vie sont très faibles. Elles sont donc difficiles à voir. En tout état de cause, l'état actuel de la LES sur ce cas, comme des expérimentations, ne permet pas de conclure, de façon claire, sur la validité des structures de flamme décrites ici.

7.4.11 Calculs de viscosités

Pour finir, comme dans la section 7.3, on calcule et compare les viscosités laminaire, artificielle et turbulente. On ne présente ici que les résultats pour les viscosités du second ordre, car les résultats pour la viscosité du quatrième ordre ne sont pas très différents de ceux présentés précédemment. On rappelle que, pour calculer les valeurs de viscosité artificielle, il a fallu faire un certain nombre d'hypothèses énumérées section 7.3.

Phase porteuse

La figure 7.78 présente les rapports de viscosités turbulente et artificielle avec la viscosité laminaire. Il est, tout d'abord, intéressant de constater que les niveaux de viscosité turbulente sont très similaires à ceux obtenus dans le calcul non réactif. On note, de plus, que le rapport ν_t/ν_{lam} diminue sensiblement dans les gaz chauds, comme on s'y attendait.

L'étude du calcul non réactif révélait la très faible influence de la viscosité artificielle d'ordre 2, bien plus faible que la viscosité cinématique et, par conséquent, négligeable devant la viscosité turbulente. La figure 7.78 démontre la nécessité d'utiliser la viscosité artificielle pour stabiliser un calcul avec flammes. Les forts gradients de température (malgré l'épaississement) sont détectés par le senseur de Colin et la quantité de viscosité ajoutée est alors très importante (de l'ordre de la viscosité turbulente). Cet ajout est assez localisé près de la flamme, ce qui permet de ne pas perturber l'écoulement, globalement.

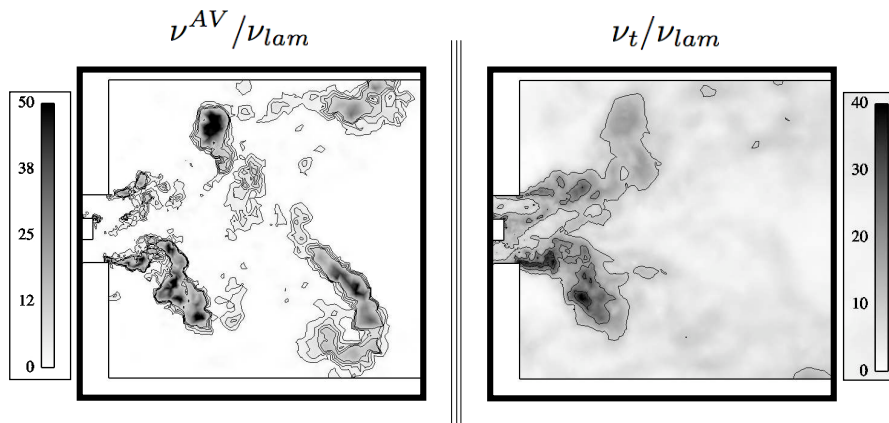


FIG. 7.78 - Rapport de viscosités artificielle (à gauche) et turbulente (à droite) avec la viscosité laminaire. Les iso-contours en noir indiquent les niveaux de rapport de 0 à 10 à gauche et de 0 à 30 à droite.

Phase dispersée

La figure 7.79 indique les niveaux de viscosités artificielle et turbulente dans la phase dispersée. Afin de pouvoir comparer les mêmes grandeurs (homogènes à des viscosités cinématiques), on divise la viscosité dynamique turbulente par $\rho_p \alpha_p$. Les valeurs de viscosité turbulente pour la phase dispersée sont comparables à celles de la phase porteuse. Néanmoins, elles sont très nettement inférieures aux niveaux de la viscosité artificielle. Celle-ci est, en effet, extrêmement élevée, aux alentours $10^{-2}/10^{-1}$ et donc occulte le modèle de turbulence. L'utilisation de viscosité artificielle est donc indispensable pour pouvoir résoudre les équations de la phase dispersée, dans une configuration complexe comme MERCATO.

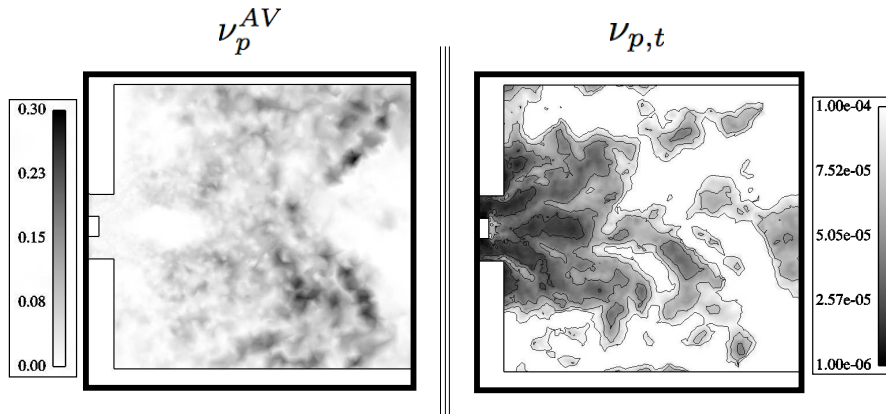


FIG. 7.79 - Viscosités artificielle (à gauche) et turbulente (à droite) dans la phase liquide

7.4.12 Conclusions

- **Sur les résultats obtenus** Les résultats obtenus, dans cette section, démontrent qu'AVBP permet la description de la combustion turbulente et diphasique dans un foyer aéronautique (la chambre MERCATO est plus simple mais présente des similitudes, notamment le système d'injection). Les comparaisons avec les résultats obtenus, via PIV, valident la formulation Eulérienne employée pour simuler le comportement de la phase dispersée, ainsi que la méthodologie choisie pour injecter le carburant dans le foyer. Ces résultats confirment donc les conclusions de S.Pascaud [170], quant à la faisabilité des LES diphasiques réactives avec AVBP. Ils ont permis, en outre, de proposer une description de la combustion diphasique au sein d'une chambre de combustion, proche d'un foyer aéronautique réel.

Il faut toutefois rappeler que cette description reste incomplète puisqu'occultant le côté polydispersé du spray. On peut imaginer que la présence de gouttes beaucoup plus petites (et s'évaporant bien plus rapidement) pourrait faire apparaître du fuel gazeux bien plus en amont de la flamme obtenue dans le calcul et impliquer la présence de flammes de prémélange. Il est donc clair que la méthode Euler-Euler, si elle donne satisfaction dans ce cas, devrait être améliorée dans des cas où l'aspect polydispersé serait plus décisif (comme l'allumage). Le recours à des méthodes Lagrangiennes pourrait aussi être nécessaire.

- **Sur l'emploi du couple {schémas centrés+viscosité artificielle}** L'étude des viscosités artificielles mène à une conclusion assez similaire à celle de la section 7.3, en ce qui concerne la phase porteuse. Là où cela n'est pas nécessaire, la viscosité artificielle est **très faible** et **interagit donc peu avec la physique**. Le calcul réactif apporte une donnée supplémentaire : la viscosité s'applique, là où se trouve la flamme, afin d'adoucir les gradients de température, qui restent importants, malgré l'épaississement. En d'autres termes, **elle stabilise le calcul, sans trop l'influencer**, ce qui est prévu.

Le bilan est moins réjouissant concernant les quantités de viscosité injectées dans les équations de la phase dispersée. Les schémas centrés ont beaucoup de difficultés à transporter des fronts d'onde raides et assurer la stabilité non linéaire du calcul n'est pas possible sans viscosité artificielle.

Cette étude de la viscosité artificielle, dans un calcul diphasique, met donc en évidence deux points :

1. La viscosité artificielle implantée dans le code AVBP pour la phase dispersée joue son rôle. Elle stabilise le calcul, en particulier là où les gradients sont importants, limitant des effets comme le phénomène de Gibbs et la dispersion, et évitant des valeurs interdites par la physique (fractions volumiques négatives...).

2. Malheureusement, contrairement à la viscosité artificielle dans la phase gazeuse, les quantités injectées dans les équations du mouvement des gouttes sont importantes et surtout cette application **n'est plus locale**. Ces équations sont, en effet, bien plus difficiles à stabiliser que les équations de Navier-Stokes, du fait de l'absence de termes diffusifs (sans compter les termes de sous-maille) et d'un terme de pression qui éviterait l'accumulation des particules. Les 'clusters' de particules ou encore les gradients très raides de vitesse sont très nombreux dans une configuration réelle et de ce fait, les senseurs déclenchant l'ajout de viscosité artificielle sont très souvent activés. **Celle-ci occulte donc les modèles physiques**, comme le tenseur des contraintes de sous-maille pour les gouttes. Un test simple consistant à désactiver la contribution de sous-maille démontre que son impact est négligeable, puisque le calcul ne présente aucune différence notable avec ou sans celle-ci.

On peut donc en conclure que la stratégie {schémas centrés + viscosité artificielle }, efficace pour la phase gazeuse, n'est pas adéquate pour la description de la phase dispersée. Il apparaît donc clairement que le passage à des schémas upwind est fortement conseillé. Dans le contexte d'AVBP, il est probable que les schémas de distribution de résidus sont les meilleurs candidats, du fait de leurs liens étroits avec la méthode *cell-vertex* . Il reste tout même à les adapter au système d'équations présenté dans la section 1.2.

Troisième partie

Passage aux chambres d'hélicoptère : prise en compte de l'acoustique entrée-sortie

Table des matières

8	Calcul des impédances d'entrée et de sortie d'une chambre de combustion	275
8.1	Introduction	275
8.2	Article	276

TABLE DES MATIÈRES

Chapitre 8

Calcul des impédances d'entrée et de sortie d'une chambre de combustion

8.1 Introduction

Dans cette dernière partie, on présente un travail centré sur la détermination des conditions limites acoustiques d'entrée et de sortie d'une chambre de combustion. Leur rôle, dans la génération d'instabilités de combustion, est en effet avéré [138], puisqu'elles ont une influence sur l'amortissement (ou non) des ondes de pression émises par la flamme. L'étude de la stabilité d'un brûleur avec la LES est compliquée par deux constatations :

- ▷ Il est très difficile d'écrire une condition limite dans un code temporel comme AVBP reproduisant une impédance acoustique, car il s'agit d'une grandeur définie dans le domaine fréquentiel [76] :

$$Z(\vec{x}, \omega) = \frac{1}{\bar{\rho}\bar{c}} \frac{\hat{p}}{\vec{u} \cdot \vec{n}} \quad (8.1)$$

où ω est la pulsation, $\bar{\rho}$ la masse volumique moyenne, $\bar{c}$ la vitesse de son moyenne, $\hat{p}$ et $\vec{u}$ l'amplitude des fluctuations de pression et de vitesse à la pulsation ω et $\vec{n}$ une normale associée à une direction de propagation. Caractériser l'impédance dans le domaine temporel requiert donc d'utiliser des produits de convolution entre les signaux de pression et de vitesse en temps réel dans la LES, ce qui est coûteux en temps de calcul et en mémoire (puisque'il faut sauvegarder un certain nombre de solutions).

- ▷ Au même titre que pour le calcul d'une fonction de transfert de flamme [86], il existe plusieurs manières d'étudier la stabilité du brûleur avec un code temporel. On peut imaginer forcer acoustiquement la chambre de combustion harmonique par harmonique ou à l'aide d'un bruit blanc. Quelle que soit la méthode choisie, étudier la stabilité sur un domaine de large bande peut s'avérer, là encore, très coûteux.

En parallèle des calculs LES, il est donc intéressant d'utiliser des solveurs de l'équation de Helmholtz pour étudier plus spécifiquement le couplage acoustique / flamme, c'est-à-dire l'équation des ondes sonores dans l'espace fréquentiel et qui s'écrit, dans le cas d'un milieu réactif :

$$\vec{\nabla} \cdot (\bar{c}^2 \vec{\nabla} \hat{p}) + \omega^2 \hat{p} = -i\omega(\gamma - 1)\Omega'_T \quad (8.2)$$

où γ est le coefficient polytropique et Ω'_T est le dégagement de chaleur. Un code de calcul, écrit par L.Benoit [19], d'après les premiers travaux de C.Nottin au laboratoire EM2C [164] et nommé AVSP, permet de résoudre le problème aux valeurs propres obtenu après discrétisation suivant la méthode de Galerkin (les opérateurs sont les mêmes que dans AVBP) dans des configurations tridimensionnelles complexes telles que les chambres de combustion industrielles. Les sorties sont les valeurs propres les plus petites (ce sont les plus basses fréquences), ainsi que les vecteurs propres correspondants (champs de pression acoustique). La partie imaginaire des fréquences, correspondant au taux d'amplification (ou d'amortissement selon le signe), permet alors de savoir si les modes acoustiques sont stables ou non. Les solveurs de Helmholtz étant bien plus rapide qu'une LES, on voit alors l'intérêt de les utiliser aussi pour étudier les instabilités de combustion.

Les travaux de Sensiau [222] et Myrczik [133] ont mis clairement en évidence l'importance de considérer un maximum d'éléments de la géométrie de la chambre de combustion (détails du tourbillonneur, prise en compte de contournement), ainsi que l'influence des conditions limites sur les calculs de modes propres acoustiques.

L'équation, assez classique, résolue dans le code AVSP, est développée à partir de certaines hypothèses et notamment deux sur lesquelles on va revenir [65, 176, 19] :

1. L'écoulement moyen est à nombre de Mach faible.
2. La pression moyenne est constante dans la chambre.

Ces deux hypothèses peuvent indiquer les limites du domaine de calcul d'AVSP. En effet, une chambre de combustion est, la plupart du temps, précédée d'un diffuseur et suivi d'un distributeur. La vitesse de l'écoulement peut être élevée et les effets de compressibilité nets. Les deux hypothèses énoncées ne s'appliquent plus et ces éléments ne peuvent donc pas être pris en compte dans AVSP. Il faut donc définir des conditions limites permettant de reproduire les effets acoustiques de ces zones assimilables à des tuyères sur les modes propres de la chambre, d'où la nécessité de pouvoir calculer l'impédance acoustique à l'extrémité d'un tube.

8.2 Article

On inclut, dans la suite, un article soumis à l'*AIAA Journal* décrivant les méthodes de détermination des impédances d'entrée et de sortie de conduits à section variable. Cet article présente trois stratégies possibles pour le calcul de coefficients de réflexion et d'impédance.

- ▷ **Formulations analytiques.** Elles reposent sur l'hypothèse de compacité des tuyères ($\lambda \gg L$, avec λ , la longueur d'onde et L , la longueur de la tuyère) et sur les lois de conservation. On démontre et on généralise les résultats obtenus par Marble et Candel [136]. Le résultat ne dépend pas de la fréquence supposée faible.
- ▷ **Tuyères de longueur finie.** L'hypothèse de compacité n'est plus valide pour des longueurs d'onde plus faibles. En partant des équations d'Euler quasi-monodimensionnelles linéarisées, on obtient les équations de fluctuations de vitesse et de pression dans l'espace de Fourier, comme [247, 136, 26]. On propose de discrétiser les dérivées spatiales en utilisant la méthode des différences finies. Le système d'équations différentielles ordinaires obtenu est résolu pour chaque fréquence, ce qui permet d'obtenir, très rapidement, une carte des impédances sur une large plage de fréquence.
- ▷ **Forçage acoustique.** La dernière méthode fait appel à un code permettant de résoudre les équations d'Euler (en l'occurrence, il s'agit d'AVBP ici) dans le domaine temporel. On force acoustiquement (IWM : inlet wave modulation [110]) la tuyère et on récupère les ondes acoustiques réfléchies. En comparant, on obtient l'impédance à la fréquence de forçage. Pour obtenir la

même carte $Z(\omega)$ qu’avec la méthode précédente, il faut donc un certain nombre de calculs. En revanche, celle-ci ne fait aucune hypothèse, en ce qui concerne l’écoulement moyen. L’article se termine par une présentation de résultats et une série de validation des méthodes, ainsi qu’un calcul d’influence de la condition limite acoustique dans un foyer aéronautique réel.

Inlet and outlet boundary conditions for acoustic eigenmodes computation in gas turbines combustion chambers

N. Lamarque*

CERFACS, 31057 Toulouse, France

and

T. Poinsot†

Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, 31400 Toulouse

Understanding and predicting acoustic instabilities in combustion chambers of gas turbines requires the knowledge of the acoustic behavior (characterized by their impedance) of all inlets and outlets feeding the combustion chamber. Inlets and outlets of chambers are often represented as one-dimensional nozzles and existing methods to evaluate impedances of choked and unchoked nozzles are described: (1) analytical formulae,¹⁻³ (2) numerical methods using the linearized Euler equations and a finite-difference solver in Fourier space (called FD method here) and (3) full space-time solver where the response of the nozzle is studied by forcing its inlet (or outlet) and measuring its response in the time domain. These three methods are compared in reference cases (a straight duct and a subsonic distributor). Practical implications for gas turbines are discussed: in such cases, if the diffusers and distributors connected to the chamber are not choked, it is shown that solving the acoustic problem becomes very difficult as compressors and turbines impedances are usually not known. This paper finally shows how these impedances control the acoustic activity of a combustion chamber by presenting an example of acoustic eigenmodes calculation in a realistic gas turbine, using a Helmholtz solver and various impedances for the inlet and outlet of the combustor.

*PhD Student

†Research Director, AIAA Associate Fellow

Nomenclature

$\dot{m}$	Mass flow rate (kg/m^{-3})
$\mathcal{A}$	Acoustic wave amplitude (Pa)
T	Transmission coefficient
$\vec{n}$	Unit normal vector
$\vec{x}$	Position vector
A	Section (m^2)
c	Sound speed (m/s)
c_p	Mass specific heat capacity for constant pressure ($J/kg/K$)
c_v	Mass specific heat capacity for constant volume ($J/kg/K$)
f	Frequency (Hz)
g_1	Real-valued function
g_2	Real-valued function
h	Space step (m)
K	Real constant
k	Wave number (rad/m)
L	Nozzle length (m)
N	Number of discretisation nodes
p	Pressure (Pa)
p_t	Total pressure (Pa)
R	Reflection coefficient
r	Molar perfect gas constant ($J/mol/K$)
s	Entropy ($J/kg/K$)
T	Temperature (K)
t	Time (s)
W	Molar mass (kg/mol)
W_{ac}	Total acoustic energy flux
Y	Reduced acoustic admittance
Z	Reduced acoustic impedance

Subscripts

1	Upstream value
2	Downstream value
x	x-axis value
y	y-axis value

Special notations

$(\cdot)'$	Fluctuating values
$[A], [C]$	$N \times N$ real matrices
$[B]$	$N \times N$ complex matrix
$[D]$	2×2 invertible matrix
$(\bar{\cdot})$	Mean values
δ^-	First order upwind differences
Δ_0	Second order central differences
$\{p'\}$	Acoustic pressure amplitude N vector

Superscripts

(j)	Discretisation index
$+$	Downstream travelling wave
$-$	Upstream travelling wave
ϵ	Parameter
I	Incident wave
R	Reflected wave

Greek letters

δ	Adimensionalized volume mass fluctuation
γ	Polytropic gas constant
λ	Wave length (m)
ν	Adimensionalized velocity fluctuation
Ω	Computational domain
ω	Angular frequency (rad/s)
Ω'_T	Heat release amplitude(rad/s)
ϕ	Real-valued function
ρ	Volume mass (kg/m^3)
φ	Adimensionalized pressure fluctuation

I. Introduction

Combustion instabilities (CI) are an important research theme for the gas turbine industry.⁴ The central role played by acoustics in many combustion instability scenarios has been the subject of long controversies but is now more and more widely recognized. Two classes of methods can be used today to study oscillations in combustors:⁵⁻⁹

- Large Eddy Simulations (LES) are becoming standard tools to study combustion stability in many modern combustion devices such as aero or industrial gas turbines, rocket engines or industrial furnaces. When LES are performed using compressible

solvers, they directly provide the time-resolved flow and the acoustic field. Multiple recent papers have demonstrated that LES accurately predict mean flow fields in turbulent combustors.^{10–13} Other recent studies^{14–16} demonstrate that compressible LES also predict the acoustic activity in turbulent combustors correctly and therefore can be used to study combustion instabilities. However a major drawback of LES methods is their cost and the fact that they only forecast the most amplified mode for a given set of boundary conditions, thereby limiting the understanding of the phenomena which control the appearance of CI.

- Since LES remain expensive, developing alternative approaches is an interesting path: studying the linear stability of combustors is the most obvious method. This is usually achieved by Helmholtz codes which freeze the mean flow and solve the linearized wave equation to predict the frequencies and the growth rates of the acoustic modes of the combustor.^{5,7,8,17,18} These codes run much faster than LES and work in the frequency domain while LES work in the time domain. They rely on crude modeling assumptions for the base flow (which is often supposed to be the mean flow) and for the effect of the flame on the acoustic field (using a flame transfer function). They are well suited to parametric studies, for example to optimize damping devices or combustion chamber shapes which minimize oscillations.

Both compressible LES and Helmholtz solvers naturally include acoustics and will provide acoustic fields correctly if a crucial and often forgotten information is available: the acoustic impedances of all inlets, outlets and walls^a. In real engines, the combustion chamber is fed by a diffuser and flow into a distributor (Fig. 1). A central question to evaluate impedances is to know which elements of the engine really determine the impedance of the diffuser and of the distributor. In other words, how far do we have to go upstream or downstream of the chamber to identify a non ambiguous boundary condition for acoustics? Distributors are usually choked so that most authors consider that the throat is a proper place to specify acoustic boundary condition. However, in certain cases, distributors are not choked (during start-up for example where instabilities are often observed) and in most cases, diffusers are not choked. For those situations, the evaluation of impedances can become a critical issue. The objectives of this paper are:

- to recall simple analytic methods to evaluate impedances of one-dimensional ducts and extend the approach of Marble and Candel,²

^aRigid walls obviously correspond to simple zero velocity conditions which are simple to implement but gas turbine chambers often use multiperforated walls to cool the combustion chamber and these walls have complex impedances.¹⁹ Multiperforated walls are not considered here.

- to present a tool able to predict the impedance of combustor inlets and outlets by approximating them as nozzle flows,
- to give simple academic examples of impedance calculations,
- to discuss the conditions that allow an evaluation of the impedances of a real gas turbine, taking into account only the geometry of the diffuser and distributor as well as the mean flow.
- to present an example of the importance of inlet and outlet impedances in the computation of modes in a real gas turbine chamber.

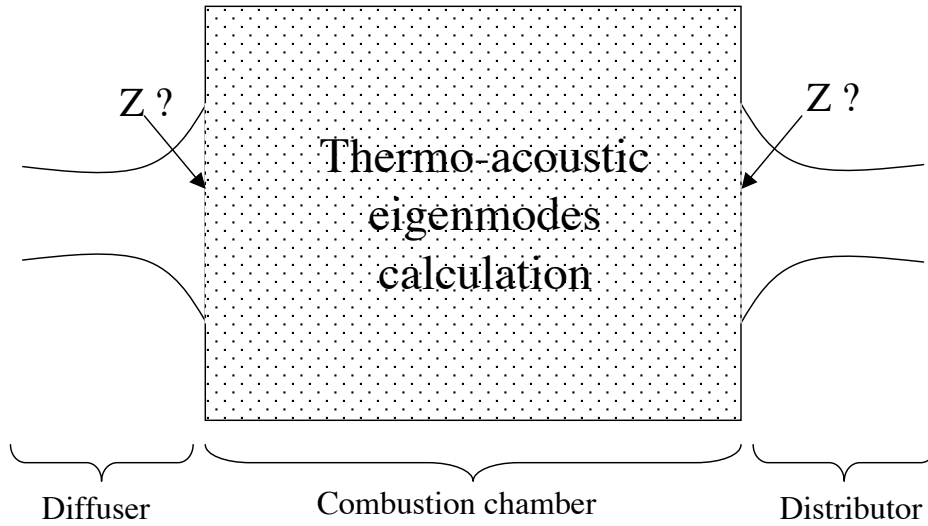


Figure 1. Combustion chamber with diffuser and distributor. Ducts feeding the chamber are replaced by acoustic impedances for the eigenmode calculation.

Reduced acoustic impedances measure the ratio between the fluctuations of acoustic pressure and velocity at a given frequency :

$$Z(\omega) = \frac{p'}{\bar{\rho} \bar{c} \vec{u}' \cdot \vec{n}}, \quad (1)$$

Impedance is a complex number function of ω . In fluids at rest, its real part is closely linked to the acoustic energy fluxes $p' \vec{u}'$ (a zero real part means the acoustic flux is zero since pressure and velocity have opposite phases).⁹ It is well known in some particular cases : $Z = 1$ for an infinitely long duct, $Z = 0$ for an outlet at constant pressure and $Z \rightarrow \infty$ on a rigid wall. In the last relation, impedance is often replaced by its inverse called admittance and defined as : $Y = 1/Z$.

There are three main methods to evaluate impedances (figure 2):

- In simple cases and at low frequencies, analytical formulations may be available^{2,3} and are described in Section II.
- For cases where the geometry of the considered component (diffuser or distributor) becomes complex and the frequency is not low, the one-dimensional Euler equations can be linearized around the mean state. Impedances at one end of the component can be obtained as a function of the geometry only if the flow is choked, and as a function of the geometry AND the impedance at the other side of the component if the flow remains subsonic. Such methods (called here FD method because a finite difference solver is required to solve the linearized equations in Fourier space) are presented in Section III.D.
- Thirdly, a space-time solver (a compressible Large Eddy Simulation code for example) can also be used to force the component with harmonic waves and measure its response in terms of impedances in the time domain. This method is expensive, it is described rapidly in Section V and used here as a reference technique to evaluate the precision of FD approaches.

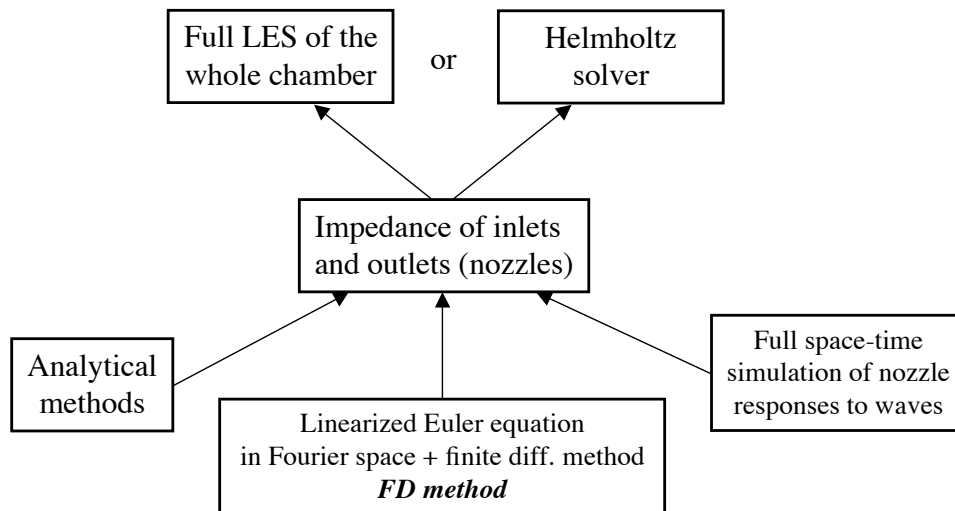


Figure 2. Connections between the different calculations needed to study the thermoacoustic stability of combustion chambers.

Finally, section VII of the article illustrates the role of impedances (or admittances): the principles of Helmholtz solvers are briefly described and the influence of the boundary conditions is highlighted in the case of a gas turbine chamber including all parts (casing, swiler, combustion chamber, dilution holes, choked outlet nozzle).

II. Analytical formulations for impedances of compact nozzles

At low frequencies, computing the impedance of a given component of arbitrary shape can be performed by computing the impedance of a nozzle which would have the same cross section. Several analytical formulations for reflexion coefficients or impedances have been developed for simplified cases. Although these developments are obtained using strong hypothesis, their accuracy often remains acceptable, even when nonlinear effects occur.²⁰ The acoustic waves are here considered as plane waves since their wavelengths are large in comparison with the characteristic lengths of the ducts. The general form of acoustic pressure and velocity in constant section ducts can be written:^{2,9}

$$\frac{p'}{\gamma \bar{p}} = \mathcal{A}^+ \exp(ik^+x - i\omega t) + \mathcal{A}^- \exp(-ik^-x - i\omega t) \quad (2)$$

$$\frac{u'}{\bar{c}} = \mathcal{A}^+ \exp(ik^+x - i\omega t) - \mathcal{A}^- \exp(-ik^-x - i\omega t) \quad (3)$$

where $k^+ = \omega/(\bar{c} + \bar{u})$ and $k^- = \omega/(\bar{c} - \bar{u})$. Determining the acoustic boundary conditions requires the determination of an impedance as defined by Eq.(1) or a reflection coefficient R given by:

$$R = \frac{\mathcal{A}^R}{\mathcal{A}^I} \quad (4)$$

The relation between R and Z depends on the orientation of $\vec{n}$. For $\vec{n}$ pointing towards positive abscissae, it is written:

$$R = \frac{Z - 1}{Z + 1} \quad (5)$$

The simplest approximation has been described by Rienstra,²¹ who showed that the reflection coefficient of an open outlet is -1 (or zero impedance) for zero Strouhal number flows. This simplification can be used for academic experimental setups, but in the context of gas turbines, its application really remains limited as combustion chambers rarely flow into open atmosphere but into high pressure stators followed by turbines.

A first approach to determine reflection coefficients or impedances of these passages is to consider them as compact nozzles (figure 3), as proposed by Marble and Candel.^{2,3} When the characteristic scale of the fluctuations is large compared to the duct length (i.e $\lambda \gg L$), the duct can be seen as a discontinuity in the wave propagation. Thus, it is not necessary to solve the flow in the duct and its influence can be replaced by matching conditions (built in the same way as jump conditions through a shock wave).² For example, in the distributor following the combustion chamber of aircrafts, a typical length scale is 10 cm (the length of the distributors vanes). For burnt gases at 1200K with a sound speed of 700 m/s, a

reasonable compactness condition ($\lambda \approx 10L$) leads to a critical frequency f_c of the order of 700 Hz : the distributor nozzle can then be considered as compact for all frequencies up to 700 Hz. Marble and Candel² have used conservation laws in subsonic and choked compact nozzles to derive reflection coefficients. The conservation of mass flow ($\dot{m} = \rho u A$) between inlet (side 1) and outlet (side 2) can be written:

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_2. \quad (6)$$

If there is neither heat losses nor normal shock, the total temperature, defined by $T_t = T \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)$, with $M = u/c$, is also conserved between side 1 and side 2, leads to:

$$T_{t,1} = T_{t,2}. \quad (7)$$

The two conservation equations Eq.(6) and (7) imply that:

$$\frac{\dot{m}'_1}{\dot{m}_1} = \frac{\dot{m}'_2}{\dot{m}_2} \quad \text{and} \quad \frac{T'_{t,1}}{\bar{T}_{t,1}} = \frac{T'_{t,2}}{\bar{T}_{t,2}}, \quad (8)$$

with:

$$\frac{\dot{m}'}{\dot{m}} = \frac{1}{M} \frac{u'}{\bar{c}} + \frac{\rho'}{\bar{\rho}}, \quad (9)$$

and :

$$\frac{T'_t}{\bar{T}_t} = \frac{1}{1 + \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}^2} \left[\gamma \left(\frac{p'}{\bar{p}} \right) - \frac{\rho'}{\bar{\rho}} + (\gamma - 1) \bar{M} \frac{u'}{\bar{c}} \right]. \quad (10)$$

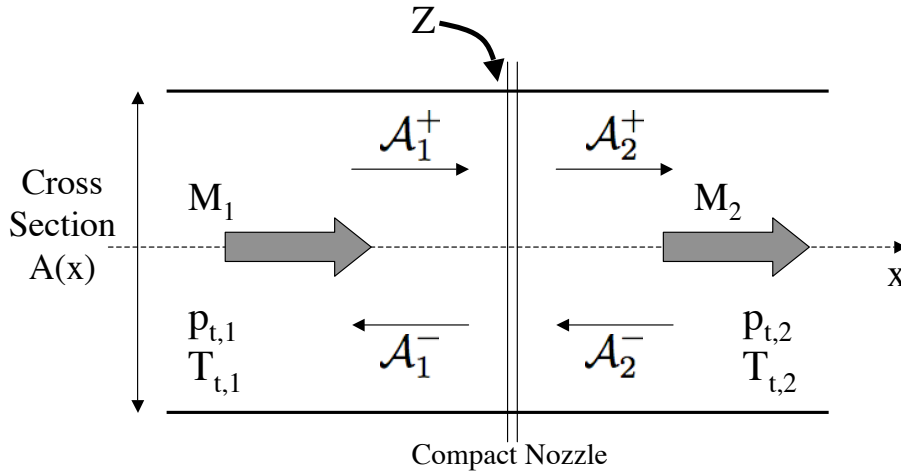


Figure 3. Compact nozzle modelled as a discontinuity between the upward and downward flows.

II.A. Choked distributor

If the distributor is choked, and if the frequency of perturbations is low, the flow rate can be assumed to match its choked value at all times. The mass flow rate is then directly linked to the thermodynamic state upstream the nozzle:

$$\dot{m} = \frac{p_{t,1}}{\sqrt{\gamma r T_{t,1}}} A_* \gamma \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{-\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (11)$$

with $p_{t,1} = p_1 \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_1^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}$ is the total pressure upstream of the nozzle (Fig. 3). The logarithmic derivative of $\dot{m}_1$ can be calculated from Eq.(11), using fraction variation of total pressure at side 1 :

$$\frac{p'_{t,1}}{\bar{p}_{t,1}} = \frac{1}{1 + \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}_1^2} \left[\gamma \left(1 - \frac{1}{2} \bar{M}_1^2 \right) \left(\frac{p'_1}{\gamma \bar{p}_1} \right) + \gamma \bar{M}_1 \frac{u'_1}{\bar{c}_1} + \frac{1}{2} \gamma \bar{M}_1^2 \frac{\rho'_1}{\bar{\rho}_1} \right], \quad (12)$$

and Eq.(10) written at side 1. This leads to^b:

$$\frac{\dot{m}'_1}{\dot{m}_1} = \frac{p'_{t,1}}{\bar{p}_{t,1}} - \frac{1}{2} \frac{T'_{t,1}}{T_{t,1}} = \frac{1}{1 + \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}_1^2} \left[\frac{\gamma}{2} (1 - \bar{M}_1^2) \left(\frac{p'_1}{\gamma \bar{p}_1} \right) + \frac{\gamma+1}{2} \bar{M}_1 \frac{u'_1}{\bar{c}_1} + \frac{1}{2} (1 + \gamma \bar{M}_1^2) \frac{\rho'_1}{\bar{\rho}_1} \right]. \quad (13)$$

Then, combining Eq.(9) written at side 1 and (13) entails:

$$\frac{u'_1}{\bar{u}_1} = \frac{1}{2} \frac{T'_1}{T_1} \quad \text{or} \quad \frac{u'_1}{\bar{c}_1} - \frac{\gamma}{2} \bar{M}_1 \left(\frac{p'_1}{\gamma \bar{p}_1} \right) + \frac{1}{2} \bar{M}_1 \frac{\rho'_1}{\bar{\rho}_1} = 0, \quad (14)$$

which is equivalent to write that the fluctuating Mach number is zero :

$$M'_1 = \bar{M}_1 \left(\frac{u'_1}{\bar{u}_1} - \frac{1}{2} \frac{T'_1}{T_1} \right) = 0.$$

Supposing that there is no incoming entropy wave $s'_1 = 0$, so that : $\frac{\rho'_1}{\rho_1} = \frac{p'_1}{\gamma \bar{p}_1}$, Eq.(14) leads to an expression for the acoustic inlet impedance :

$$Z_1 = \frac{2}{\bar{M}_1(\gamma-1)} \quad \text{hence} \quad R_1 = \frac{\mathcal{A}_1^-}{\mathcal{A}_1^+} = \frac{1 - \frac{1}{2}(\gamma-1)\bar{M}_1}{1 + \frac{1}{2}(\gamma-1)\bar{M}_1} \quad (15)$$

$\mathcal{A}_1^-$ does not depend on the upstream flow as no wave can come from upstream the throat. Eq.(15) also shows that a choked nozzle behaves nearly like a rigid wall ($R = 1$) for low upstream Mach number ($M_1 \rightarrow 0$), which is a commonly used boundary condition for choked nozzles.

^bThis relation can also be written at side 2 but this has no interest here.

II.B. Choked diffuser

The case of a choked diffuser is particular. Diffusers generally disemboque in a chamber casing or a plenum, where the flow is subsonic: if the diffuser is choked, there is also a shock in the diffuser. Stow et al.²² present an analysis of the acoustic response of a choked diffuser with a normal shock in the expansion part of the duct. Assuming there is no disturbance coming from upstream ($A_1^+ = 0$), they showed that:

$$R_2 = \frac{1 - \gamma \bar{M}_2 + (\gamma - 1) \bar{M}_2^2}{1 + \gamma \bar{M}_2 + (\gamma - 1) \bar{M}_2^2}. \quad (16)$$

A generalisation for transmission coefficients has also been derived by Moase et al.,²³ assuming there can be perturbation upstream the shock and A_1^+ is known.

II.C. Unchoked distributor / diffuser

In the case of a subsonic flow in the nozzle, information can propagate in both directions. Thus, information on the other side of the component is needed to determine reflection coefficients. Conservation of mass flow rate and total temperature (Eq.(8) with Eq.(9) and (10)) are used to write a system of two equations with 6 unknowns : $u'_1, u'_2, \rho'_1, \rho'_2, p'_1$ and p'_2 . Supposing again that there is no entropy wave ($s'_1 = s'_2 = 0$) to eliminate ρ'_1 and ρ'_2 gives the following system of two equations with 4 unknowns:

$$\frac{1}{\bar{M}_1} \frac{u'_1}{\bar{c}_1} + \frac{p'_1}{\gamma \bar{p}_1} = \frac{1}{\bar{M}_2} \frac{u'_2}{\bar{c}_2} + \frac{p'_2}{\gamma \bar{p}_2} \quad (17)$$

$$\frac{1}{1 + \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}_1^2} \left[\frac{p'_1}{\gamma \bar{p}_1} + \bar{M}_1 \frac{u'_1}{\bar{c}_1} \right] = \frac{1}{1 + \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}_2^2} \left[\frac{p'_2}{\gamma \bar{p}_2} + \bar{M}_2 \frac{u'_2}{\bar{c}_2} \right] \quad (18)$$

Writing, pressure and velocity perturbations as waves (Eq.(2) and (3)) in Eq.(17) and (18) gives :

$$\frac{1}{\bar{M}_1} (\mathcal{A}_1^+ - \mathcal{A}_1^-) + \mathcal{A}_1^+ + \mathcal{A}_1^- = \frac{1}{\bar{M}_2} (\mathcal{A}_2^+ - \mathcal{A}_2^-) + \mathcal{A}_2^+ + \mathcal{A}_2^- \quad (19)$$

$$\frac{1}{1 + \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}_1^2} [\mathcal{A}_1^+ + \mathcal{A}_1^- + \bar{M}_1 (\mathcal{A}_1^+ - \mathcal{A}_1^-)] = \frac{1}{1 + \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}_2^2} [\mathcal{A}_2^+ + \mathcal{A}_2^- + \bar{M}_2 (\mathcal{A}_2^+ - \mathcal{A}_2^-)] \quad (20)$$

If the outlet reflection coefficient $R_2 = \frac{\mathcal{A}_2^-}{\mathcal{A}_2^+}$ of the distributor is known, system (19)-(20) gives the reflection coefficient at the inlet :

$$R_1 = \frac{\mathcal{A}_1^-}{\mathcal{A}_1^+} = \frac{\bar{M}_1 + 1}{\bar{M}_1 - 1} \frac{(\bar{M}_1 - \bar{M}_2)(\bar{M}_2 + 1)(1 - \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}_1 \bar{M}_2) + (\bar{M}_1 + \bar{M}_2)(\bar{M}_2 - 1)(1 + \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}_1 \bar{M}_2) R_2}{(\bar{M}_1 + \bar{M}_2)(\bar{M}_2 + 1)(1 + \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}_1 \bar{M}_2) + (\bar{M}_1 - \bar{M}_2)(\bar{M}_2 - 1)(1 - \frac{\gamma-1}{2} \bar{M}_1 \bar{M}_2) R_2}, \quad (21)$$

while the transmission coefficient is:²

$$\mathcal{T}_1 = \frac{\mathcal{A}_2^+}{\mathcal{A}_1^+} = \frac{2\bar{M}_2}{1 + \bar{M}_2} \frac{(\bar{M}_1 + 1)(1 + \frac{\gamma-1}{2}\bar{M}_2^2)}{(\bar{M}_1 + \bar{M}_2)(1 + \frac{\gamma-1}{2}\bar{M}_1\bar{M}_2)} \quad (22)$$

The same derivation for a diffuser gives R_2 as a function of $R_1 = \frac{\mathcal{A}_1^+}{\mathcal{A}_1^-}$:

$$R_2 = \frac{\mathcal{A}_2^+}{\mathcal{A}_2^-} = \frac{1-\bar{M}_2}{\bar{M}_2+1} \frac{(\bar{M}_2-\bar{M}_1)(\bar{M}_1-1)(1-\frac{\gamma-1}{2}\bar{M}_1\bar{M}_2) + (\bar{M}_1+\bar{M}_2)(1+\bar{M}_1)(1+\frac{\gamma-1}{2}\bar{M}_1\bar{M}_2)R_1}{(\bar{M}_1+\bar{M}_2)(1-\bar{M}_1)(1+\frac{\gamma-1}{2}\bar{M}_1\bar{M}_2) + (\bar{M}_1-\bar{M}_2)(1+\bar{M}_1)(1-\frac{\gamma-1}{2}\bar{M}_1\bar{M}_2)R_1} \quad (23)$$

and the transmission coefficient is:²

$$\mathcal{T}_2 = \frac{\mathcal{A}_1^-}{\mathcal{A}_2^-} = \frac{2\bar{M}_1}{1 - \bar{M}_1} \frac{(1 - \bar{M}_2)(1 + \frac{\gamma-1}{2}\bar{M}_1^2)}{(\bar{M}_1 + \bar{M}_2)(1 + \frac{\gamma-1}{2}\bar{M}_1\bar{M}_2)} \quad (24)$$

Those results generalize the formulae given by Marble and Candel:² for $R_2 = 0$, Eq.(21) is identical to their results, while Eq.(23) matches their results when $R_1 = 0$. They are summarized in Table 1. A similar work, introducing entropy disturbances, has recently been done by Moase et al.²³

	Diffuser	Distributor
Choked	$R_2 = \frac{1-\gamma\bar{M}_2+(\gamma-1)\bar{M}_2^2}{1+\gamma\bar{M}_2+(\gamma-1)\bar{M}_2^2}$	$R_1 = \frac{1-\frac{1}{2}(\gamma-1)\bar{M}_1}{1+\frac{1}{2}(\gamma-1)\bar{M}_1}$ or $Z_1 = \frac{2}{\bar{M}_1(\gamma-1)}$
Unchoked	R_2 : see Eq.(23) $\mathcal{T}_2$: see Eq.(24)	R_1 : see Eq.(21) $\mathcal{T}_1$: see Eq.(22)

Table 1. Reflection coefficients depending on the acoustic boundary conditions and the flow regime in the low frequency limit.

III. Numerical evaluation of impedances using the linearized Euler equations

The hypothesis of compacity is only applicable when the acoustic wave length is much larger than the nozzle length, which is too strict an approximation as soon as pulsations are no more small. The problem has then to be solved in more details, e.g mean flow and then fluctuating pressures and velocities have to be calculated in the duct ^c.

^cMarble and Candel present an analytical resolution² for a finite length choked nozzle in which the mean axial velocity varies linearly along the duct. This last approximation provides the impedance everywhere in the nozzle. Nevertheless, in general, the mean velocity evolution is not linear and the acoustic problem must

The first consequence of taking finite length ducts into account is that impedances now depend on frequency, which is a major improvement in comparison with the previous approximations.

III.A. Mean flow

The inlet impedance (or outlet impedance) of a distributor (diffuser) can be obtained by solving the linearized Euler equations under the following assumption:

- the mean flow in these ducts is one-dimensional and isentropic,
- all geometrical complexities are included in the one-dimensional cross section evolution of the inlet or outlet ducts which are described like simple nozzles,
- the flow is a perfect gas with constant composition (no chemistry) and constant heat capacities.

With these assumptions, the Euler equations are written:

$$\frac{\partial \rho A}{\partial t} + \frac{\partial \rho u A}{\partial x} = 0 \quad (25)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \quad (26)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} + u \frac{\partial s}{\partial x} = 0 \quad (27)$$

The system is completed by Mariotte's law (perfect gas) : $p = \rho \frac{R}{W} T$.

III.B. Acoustics in a nozzle

For the linearization of system (25) to (27),^{1-3,24} the variables (velocity, pressure or density) are first decomposed in two parts: a mean component (overbarred values) which varies only with space coordinates and a small fluctuating one (primed values) which depends both on space and time. The compressible quasi one-dimensional Euler equations (25)-(27) are then linearized:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho'}{\bar{\rho}} \right) + \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho'}{\bar{\rho}} + \frac{u'}{\bar{u}} \right) = 0 \quad (28)$$

be solved numerically.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{u'}{\bar{u}} \right) + \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u'}{\bar{u}} \right) + \left(\frac{\rho'}{\bar{\rho}} + 2 \frac{u'}{\bar{u}} \right) \frac{d\bar{u}}{dx} = \frac{p'}{\bar{p}} \frac{d\bar{u}}{dx} - \frac{\bar{p}}{\bar{\rho}\bar{u}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p'}{\bar{p}} \right) \quad (29)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{s'}{c_v} \right) = 0 \quad (30)$$

Introducing the mean velocity $\bar{u}$ and density $\bar{\rho}$ allows to completely hide the section changes $A(x)$ in Eq.(28) to (30). For the present approach, entropy waves have not been taken into account even though the interaction of entropy waves with nozzles can be a source of instabilities.^{2,22,23} Since combustion is a strong source of entropy perturbations, it is logical to assume that these waves participate to some combustion instabilities. Some recent studies, however, suggest that the entropy waves have a limited influence on the resonant modes in swirled combustors.²⁵ Even though this simplification may not be justified for all cases, it was used in the present study and may have to be relaxed for future work. We thus consider that entropy fluctuations are zero:

$$\frac{p'}{\gamma\bar{p}} - \frac{\rho'}{\bar{\rho}} = \frac{s'}{c_p} = 0 \quad \text{so that} \quad \frac{\rho'}{\bar{\rho}} = \frac{p'}{\gamma\bar{p}} \quad (31)$$

Under the assumption of monochromatic fluctuations, one can write:

$$\frac{p'}{\bar{p}} = \varphi(x)e^{-i\omega t}; \quad \frac{u'}{\bar{u}} = \nu(x)e^{-i\omega t}; \quad \frac{\rho'}{\bar{\rho}} = \delta(x)e^{-i\omega t} = \frac{1}{\gamma}\varphi(x)e^{-i\omega t} \quad (32)$$

Using Eq.(28), (29) and (31) and introducing the local Mach number, system (28)-(29) for the perturbed pressure φ and velocity ν becomes:

$$-i\omega\varphi + \bar{u} \frac{d\varphi}{dx} + \gamma\bar{u} \frac{d\nu}{dx} = 0 \quad (33)$$

$$\frac{\bar{u}}{M^2} \frac{d\varphi}{dx} + \gamma\bar{u} \frac{d\nu}{dx} - (\gamma - 1) \frac{d\bar{u}}{dx} \varphi + \gamma \left[2 \frac{d\bar{u}}{dx} - i\omega \right] \nu = 0 \quad (34)$$

Introducing Eq.(33) in Eq.(34) also gives for the momentum equation:

$$\left(\frac{1}{M^2} - 1 \right) \bar{u} \frac{d\varphi}{dx} - \left[(\gamma - 1) \frac{d\bar{u}}{dx} - i\omega \right] \varphi + \gamma \left[2 \frac{d\bar{u}}{dx} - i\omega \right] \nu = 0 \quad (35)$$

Using reduced values, the acoustic impedance can be written:

$$Z = \frac{1}{\gamma\bar{M}} \frac{\varphi}{\nu} \quad (36)$$

Eq.(33) and (35) can be solved if appropriate boundary conditions are specified as described below.

III.C. Impedance of a choked nozzle

Distributors are most often choked in gas turbines (except for idle operating conditions). In this particular case, knowing the mean flow is enough to determine the inlet acoustic impedance of a choked nozzle. In the time domain, system (33)-(35) is strictly hyperbolic (terms in $-i\omega$ are replaced by time derivatives) and its two characteristic velocities (eigenvalues) are:

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)_{\mathcal{A}^\pm} = \bar{u} \pm \bar{c} \quad (37)$$

At the throat of a choked nozzle, $\bar{u}_* = \bar{c}_*$ which implies that the $\mathcal{A}^-$ wave does not move at the throat: no information can propagate upstream of the throat. Mathematically, it means that $x = x_*$ is a singular location for system (33)-(35). Eq.(35) at the throat with $M^* = 1$ allows to write the throat impedance^d:

$$Z_* = \frac{1}{\gamma \bar{M}_*} \frac{\varphi_*}{\nu_*} = \frac{2 \frac{d\bar{u}}{dx}|_* - i\omega}{(\gamma - 1) \frac{d\bar{u}}{dx}|_* - i\omega} \quad (38)$$

III.D. Numerical resolution

To determine inlet or outlet acoustic impedance of ducts, the mean flow needs to be characterized first. Its computation within a nozzle of cross section $A(x)$ is a simple textbook problem: as $\bar{M} = \bar{u}/\bar{c}$ is the local Mach number, one can write, using Hugoniot relations derived from the equations (25)-(27) for stationary flow :

$$\frac{A(x)}{A_*} = \frac{1}{\bar{M}} \left[\frac{2}{\gamma + 1} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \bar{M}^2 \right) \right]^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (39)$$

The Mach number is supposed to be 1 at $x = x_*$. Knowing $\bar{M}$ at a boundary section enables to calculate the critical section A_* . Then, the Mach number can be determined everywhere else using an iterative Newton-Raphson method for equation (39). All other variables can be calculated with isentropic flow relations using total values:

$$\frac{\bar{\rho}(x)}{\bar{\rho}_t} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \bar{M}^2 \right)^{\frac{-1}{\gamma-1}} \quad \text{and} \quad \frac{\bar{p}(x)}{\bar{p}_t} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \bar{M}^2 \right)^{\frac{-\gamma}{\gamma-1}} \quad (40)$$

Knowing the mean flow, the impedance can be computed as follows: for a given time

^dFor low pulsations and constant section, Eq.(33) and (35) reduce to Marble and Candel's result (Eq.(15)): in this case, Eq.(33) and (35) lead to $\frac{d\varphi}{dx} = \frac{d\nu}{dx}$, so that $\varphi = \varphi_*$ and $\nu = \nu_*$, and the impedance at the inlet is $Z_1 = \frac{1}{\gamma \bar{M}_1} \frac{\varphi_1}{\nu_1} = \frac{1}{\gamma \bar{M}_1} \frac{\varphi_*}{\nu_*}$. At the throat for $\omega \rightarrow 0$, Eq.(38) gives $Z_* = \frac{2}{\gamma-1}$, $\frac{\varphi_*}{\nu_*} = \frac{2\gamma}{\gamma-1}$ and $Z_1 = \frac{2}{(\gamma-1)\bar{M}_1}$ which is Eq.(38).

frequency ω , the computational domain is discretized in space $x = \{x^{(j)}\}_{1 \leq j \leq N}$ and the system (33)-(35) becomes:

$$-i\omega\varphi^{(j)} + \frac{\bar{u}^{(j)}}{h}\delta_{\epsilon}^{-}\varphi^{(j)} + \gamma\frac{\bar{u}^{(j)}}{h}\delta_{\epsilon}^{-}\nu^{(j)} = 0 \quad (41)$$

$$\left(\frac{1}{(\bar{M}^{(j)})^2} - 1\right)\frac{\bar{u}^{(j)}}{h}\delta_{\epsilon}^{-}\varphi^{(j)} - \left[\frac{(\gamma-1)}{h}\Delta_0^{\epsilon}\bar{u}^{(j)} - i\omega\right]\varphi^{(j)} + \gamma\left[\frac{2}{h}\Delta_0^{\epsilon}\bar{u}^{(j)} - i\omega\right]\nu^{(j)} = 0 \quad (42)$$

where the difference operators δ_{ϵ}^{+} and δ_{ϵ}^{-} are defined by:

$$\delta_{\epsilon}^{-}\varphi^{(j)} = \epsilon(\varphi^{(j)} - \varphi^{(j-1)}) \quad \text{and} \quad \Delta_0^{\epsilon}\bar{u}^{(j)} = \frac{\epsilon}{2}(\bar{u}^{(j+1)} - \bar{u}^{(j-1)}) \quad (43)$$

The parameter ϵ depends on the type of flow: for a diffuser, $\epsilon = 1$, while for a distributor $\epsilon = -1$. The system (41)-(42) is integrated from where the impedance is given ($x = x^{(1)}$) to where it is searched ($x = x^{(N)}$) as shown in figure 4. The system can thus be written in compact form :

$$[D]^{(j)} \begin{pmatrix} \varphi^{(j)} \\ \nu^{(j)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1(\varphi^{(j-1)}) \\ g_2(\nu^{(j-1)}) \end{pmatrix} \quad (44)$$

$[D]^{(j)}$ is a 2×2 matrix and the acoustic impedance can be expressed at $x = x^{(j)}$:

$$Z^{(j)} = \frac{1}{\gamma\bar{M}^{(j)}} \frac{\varphi^{(j)}}{\nu^{(j)}} \quad (45)$$

At $x = x^{(1)}$, only $Z = Z^{(1)}$ is known: typically, section 1 must be the throat for choked flows or a section where Z is known^e. The system (44) with Eq.(45) is solved as follows : in the section where the impedance is known, $\nu^{(1)}$ is set equal to a constant $K \neq 0$ so that $(\varphi^{(1)}, \nu^{(1)})^T = (\gamma M Z^{(1)} K, K)^T$, which is a set of boundary conditions for system (44). From node to node, $\forall j \in \{2, \dots, N\}$, $[D]^{(j)}$ can be inverted to give $(\varphi^{(N)}, \nu^{(N)})^T$. $Z^{(N)}$ is then recovered using again Eq.(45). Of course, due to the linearity of Eq.(33) and (35), the choice of K has no effect on $Z^{(N)}$ as pointed out by Mani.²⁶ Calculation is repeated for several frequencies to obtain the impedance curve versus frequency $Z^{(N)}(\omega)$.

IV. Numerical evaluation of impedance using the Euler equation

Another way to determine acoustic impedances of section varying ducts is to use a space-time solver and the Euler equation without linearization: extracting acoustic waves from the solution of the unsteady Euler equations is expensive but used here as a verification of the FD method of section III. The solver is here based on the cell-vertex finite volume formulation

^eIn the case of a choked distributor, the singularity is avoided by using relation (38) as the boundary condition for system (44), writing : $x_1 = x_*$ and $Z^{(1)} = Z_*$.

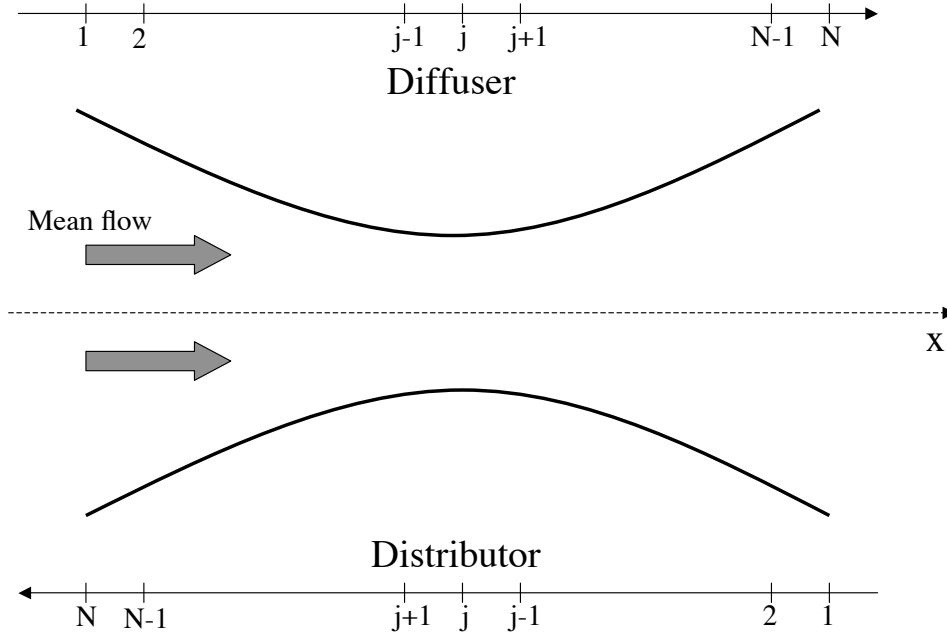


Figure 4. System (41)-(42) integration for diffusers and distributors. Boundary conditions are given at $x = x^{(N)}$.

of the Lax-Wendroff scheme^{27,28} and boundary conditions are computed following the Euler Characteristic Boundary Conditions approach.^{29,30} For example, the time simulation is solved for a distributor (figure (5)) as follows :

- The mean flow is first imposed in the duct.
- When the mean flow is established, monochromatic acoustic waves $\mathcal{A}^+$ of angular frequency ω are injected at the inlet (*resp.* outlet) of the computational domain. The outlet impedance is set to Z_2 .
- The reflected waves $\mathcal{A}^-$ are extracted from the pressure and velocity temporal signals at the inlet, using a characteristic decomposition.
- A Fourier analysis of ingoing (reference) and outgoing acoustic waves gives the real and imaginary parts of the inlet acoustic impedance at angular frequency ω .

The operation is repeated for several angular frequencies to obtain a map of $Z(\omega)$. Care has to be taken with the use of the inlet boundary condition, since it must impose both the mean flow and an acoustic wave.³¹ Moreover, it must totally evacuate the reflected waves $\mathcal{A}^-$ (non reflecting inlet boundary condition), otherwise the calculation of the inlet impedance is biased. In the following comparisons, only the case of the distributor is shown even though validations have also been made for diffusers. The procedure is similar for diffusers, except that the inlet impedance Z_1 is imposed and the outlet impedance Z_2 is calculated.

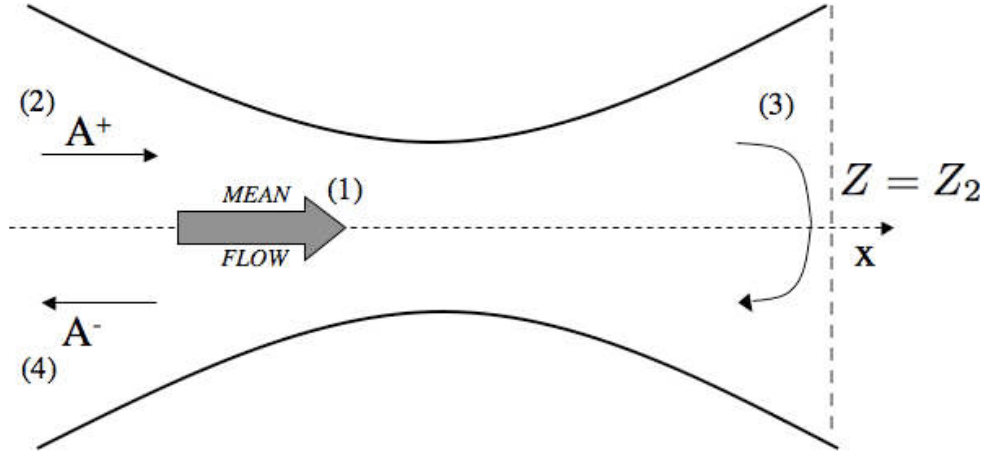


Figure 5. Impedance calculation with a temporal solver : once the mean flow is stabilized (1), downstream travelling acoustic waves $\mathcal{A}^+$ are injected at the inlet (2) and compared with the reflected acoustic waves $\mathcal{A}^-$ that come back (3)-(4).

V. Code verification

The FD method described in Section III.D is validated here in two cases :

- a constant section duct where an analytical solution is available (Section V.A),
- a distributor (unchoked) with a fixed outlet pressure where a space-time solver (Section IV) is used to evaluate the impedance by forcing the inlet in the time domain (Section V.B).

V.A. Comparison of FD method and analytical formulae in a constant section duct

For simple test cases as the constant section duct, a trivial analytical solution can be derived. The acoustic pressure and velocity of non-zero Mach number flow in a constant section duct of length L both verify:

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} - \bar{c}^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = 0 \quad (46)$$

where $\phi = \phi(x, t)$ is either p' or u' and $d/dt = \partial/\partial t + \bar{u}\partial/\partial x$. The solutions of Eq.(46) are given by Eq.(2) and (3), section II. Given the impedance at the outlet of the duct, one can write it at the inlet for $\bar{M} < 1$. It has been calculated for flow conditions summarized in Table 2 and outlet impedances $Z_2 = 0$ and $Z_2 = \infty$.

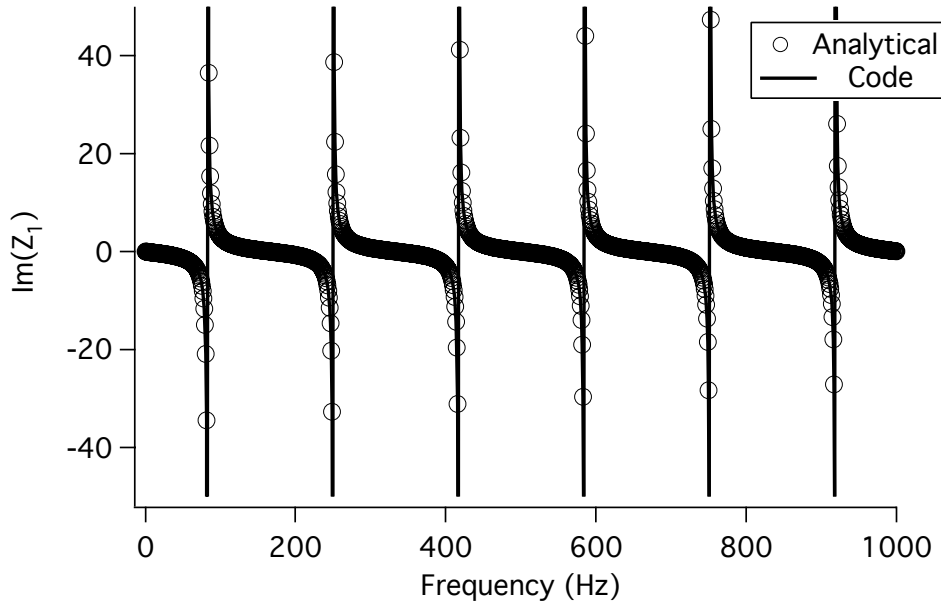
The analytical formulations of inlet impedance in those two cases are the following :

$$Z_1|_{Z_2=0} = -i \tan\left(\frac{kL}{1 - \bar{M}^2}\right) \quad (47)$$

Parameters	Value
L	0.2
ρ	1.1723
$r = R/W_{air}$	288.19
T	300
M	0.2

Table 2. Main parameters of the flow in the 1D tube.

$$Z_1|_{Z_2=\infty} = i \cot\left(\frac{kL}{1-M^2}\right) \quad (48)$$

Figure 6. Comparison between inlet impedances given by the analytical expression (47) and the FD method. The outlet impedance is $Z_2 = 0$.

Comparisons between imaginary parts of inlet impedances (real parts are zero) given by the FD method and Eq.(47)-(48) are shown on figures 6 and 7 for a frequency range from 1 to 1000 Hz. The agreement between the two methods is very good even for high frequencies.

V.B. Comparison of analytical formulae, FD technique and space-time solver for an unchoked distributor

The comparison between the different methods to calculate impedances is performed here for an unchoked distributor. The geometry (figure 8) is discretized using a non-regular Cartesian grid for the Euler equations solver and the characteristics of the flow are gathered in Table 3. The outlet impedance at $x = L_x$ is set to $Z_2 = 0$.

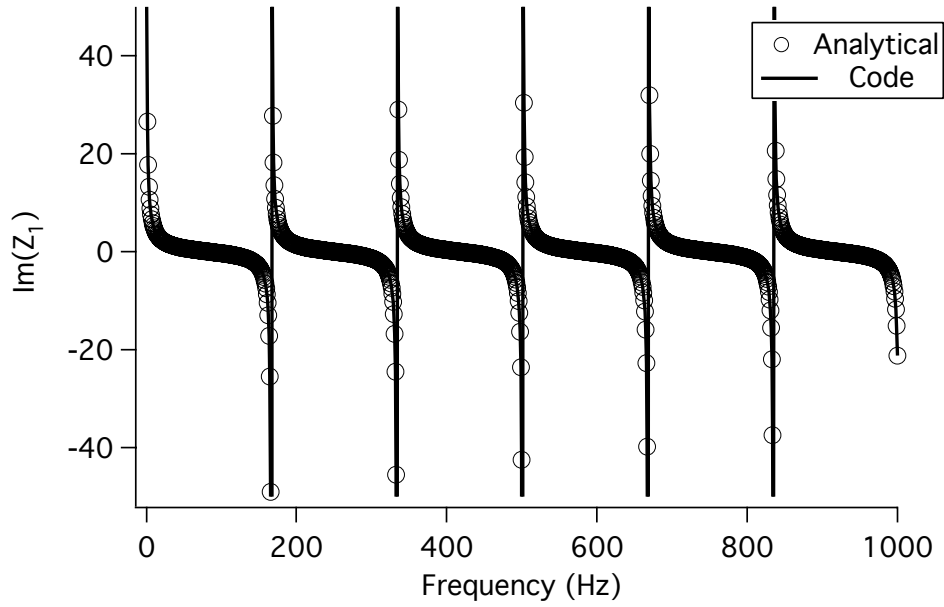


Figure 7. Comparison between inlet impedances given by the analytical expression (48) and the FD method. The outlet impedance is $Z_2 = \infty$.

Geometry	Value	Boundary conditions	Value
L_x	0.2	u_{in}	30
$L_y(inlet)$	0.015	p_{out}	1.013
N_x	101	ρ_{in}	1.1723
N_y	11	T_{in}	300
γ	1.399	$r = R/W_{air}$	288.19

Table 3. Characteristics of the variable section duct and boundary conditions.

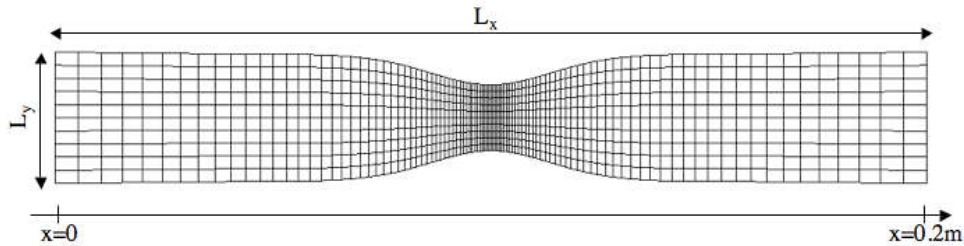


Figure 8. Geometry and mesh of the variable section duct.

Figure 9 shows a good agreement between the results of the space-time solver Euler equations solver and Eq.(39) for the mean flow in the distributor, characterized here by y -integrated Mach number $\bar{M}(x) = \int_{L_y} \bar{M}(x, y) dy$. Real and imaginary parts of inlet acoustic impedance are plotted on figures 10 and 11. Here again, the agreement between the FD method and the space-time solver is good. Moreover, the asymptotic behaviour for low frequencies for both approaches coincides with the impedance analytically obtained from

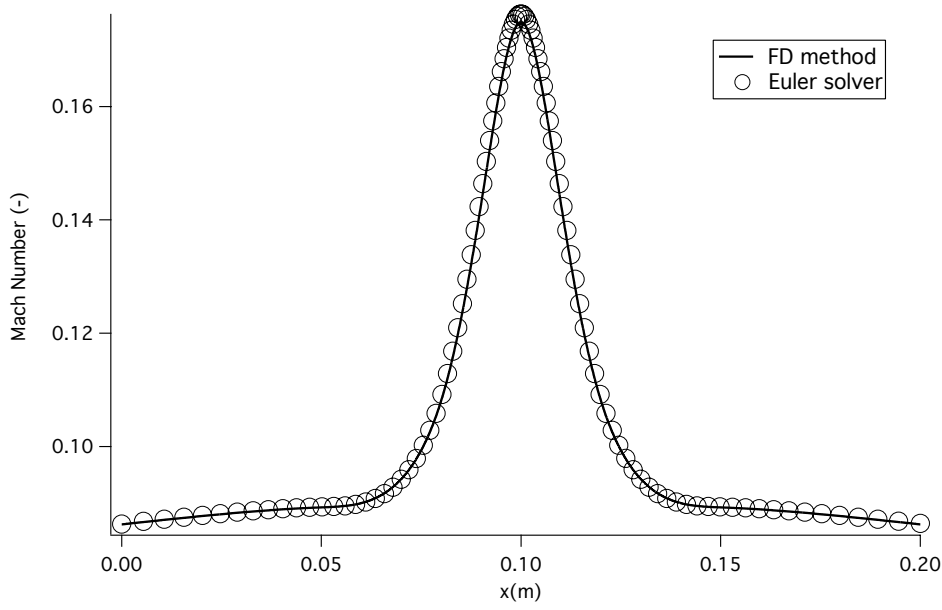


Figure 9. Mean Mach number evolution. $\bar{M}(x) = \int_{L_y} \bar{M}(x, y) dy$.

Eq.(21). Nevertheless, as in the case of a constant section duct, the real and imaginary parts of the impedance evolve quickly with frequency. It clearly shows *a posteriori* the importance of solving the system (44) and the limits of analytical formulations (such as those obtained in Section II). The peaks observed on the real part (and change of sign of the imaginary part) correspond to the acoustic modes of the nozzle. The first one is the quarter wave mode $\lambda = 4L_x$ and $f=435$ Hz. Figures 12 and 13 show that the low frequency approximation (Eq.(21)) is valid up to frequencies f of approximately 200 Hz and a wavelength $\lambda \approx 1.7m \approx 10L_x$. Note that the real part of the inlet impedance is negative for a range of frequencies. This is equivalent to a reflection coefficient modulus greater than 1. It is possible because of the presence of a mean flow, as pointed out by Munjal³² and Mechel et al.³³ In such a case, the average flux through a surface and over a period of a fluctuation is written :

$$W_{ac} = \frac{|\mathcal{A}^I|^2}{2\bar{\rho}\bar{c}} \left[(1 + M)^2 - |R|^2 (1 - M)^2 \right] \quad (49)$$

Eq.(49) shows that W_{ac} can be positive (acoustic loss) even if $|R| > 1$, as soon as there is a mean flow ($M \neq 0$)^f.

^fAs indicated by Munjal, this paradox ($|R| > 1$) is only apparent and due to the choice of the variables u' and p' to define the reflection coefficient in Eq.(5). If proper aeroacoustic variables adapted to non-zero mean flow are used to define R (the perturbed mass flow rate $\dot{m}'$ and the perturbed total enthalpy h'_t), the reflection coefficient is always less than one.

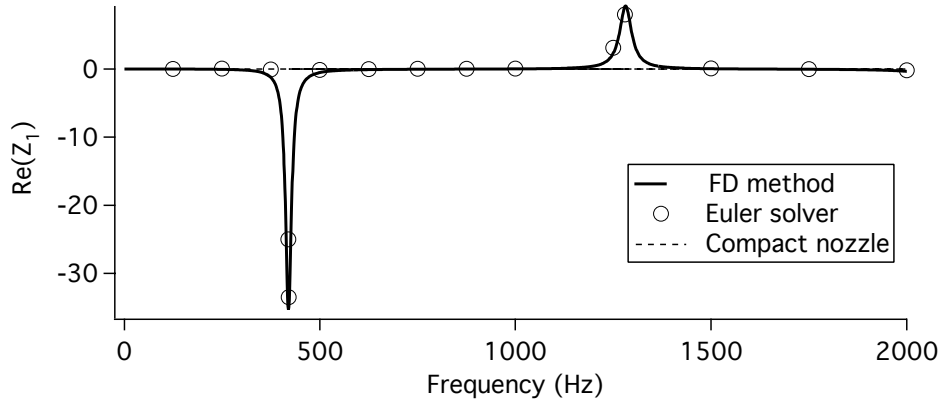


Figure 10. Real part of the inlet acoustic impedance for the nozzle of figure 8.

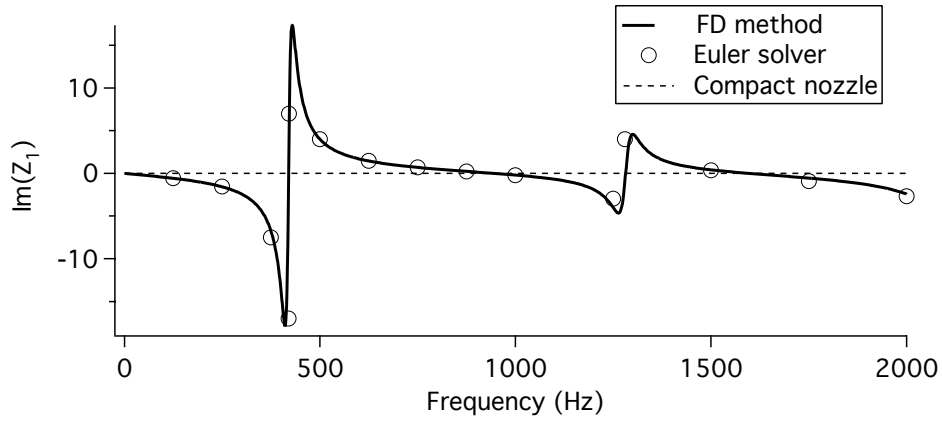


Figure 11. Imaginary part of the inlet acoustic impedance for the nozzle of figure 8.

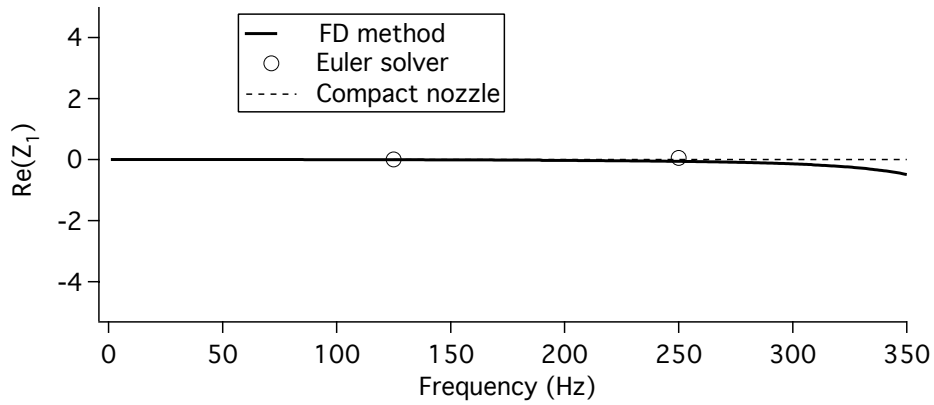


Figure 12. Zoom of the real part of the inlet acoustic impedance of variable section duct described, corresponding to the black box on figure 10.

VI. Impedances of combustion chambers in gas turbines

As recalled in Section II, it is common to set $Z = 0$ for a flow that disembogues in the atmosphere. Besides, $Y = 0$ is also often used for the inlet of a duct where the mass flow

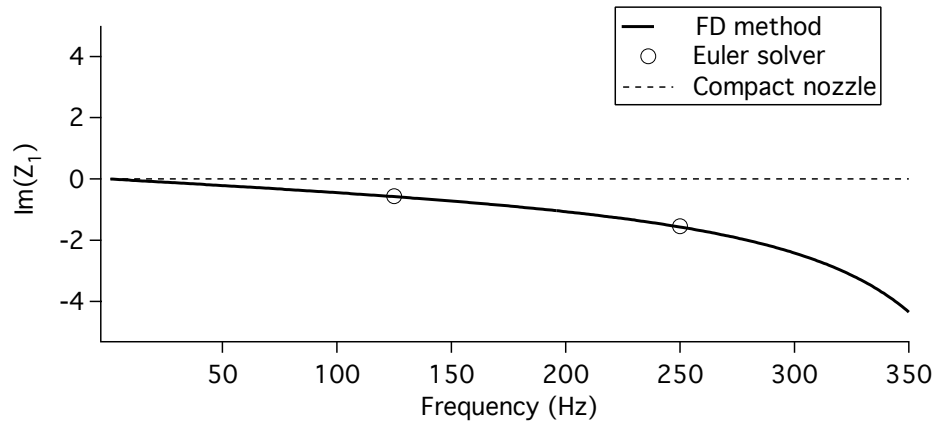


Figure 13. Zoom of the imaginary part of the inlet acoustic impedance of variable section duct described, corresponding to the black box on figure 11.

rate is imposed. These boundary conditions can be used in the case of academic configurations but not in gas turbines, where distributors and diffusers must be taken into account. The previous sections have shown that methods exist to evaluate the inlet impedance of distributors or the outlet impedances of diffusers when the impedance of the other side of the nozzle is known or when the nozzle is choked. If this impedance is not known and the nozzle is unchoked, the problem remains unsolved because the accuracy of the resolution of (44) strongly depends on the value of the impedance given at $x = x^{(1)}$. When the feeding ducts are choked, this impedance is known. As shown in section III, the impedance of a choked distributor is indeed well known at the throat because of the singularity of this location (see Eq.(38)). For a choked diffuser, a normal shock exists between the throat of the diffuser and the inlet chamber casing. The work of Stow et al.²² can then be used as the reflection coefficient of the shock has been derived (see table 1).

Unfortunately, diffusers and distributors can be fully subsonic, especially at idle regimes. In such cases, analytical formulations of section II and the hyperbolic nature of the sound wave equation show that the impedance must be known at a location to determine it somewhere else. The calculation using FD method has then to be started in a section where the impedance is known and this may become difficult in rotating machines.

The next section shows the effects of impedances changes for diffusers and distributors in the case of a realistic gas turbine. It confirms their importance and the necessity of modeling them accurately.

VII. Application of impedance methods in a Helmholtz solver for a real chamber

This section shows how Helmholtz solvers are built and provides one example of real gas turbine application where the result of the solver is directly controlled by the acoustic impedances used at inlets and outlets. Multidimensional Helmholtz codes^{15,34–36} solve the linearized acoustic wave equation in the Fourier domain: they give the complex frequency (stability analysis) and spatial structure of all acoustic eigenmodes.

The Helmholtz equation is obtained by linearizing the reactive Navier-Stokes equations under the following assumptions:^{6,36}

- low Mach number,
- no volume forces,
- linear acoustics,
- large scale fluctuations (long wavelength),
- homogeneous mean pressure,
- constant polytropic coefficient γ .

The fluctuating pressure field is then given by the wave equation^g:

$$\vec{\nabla} \cdot (c^2 \vec{\nabla} p') + \omega^2 p' = 0 \quad (50)$$

with the boundary conditions:

$$Z(\omega) = \frac{p'}{\bar{\rho} c \vec{\nabla} p' \cdot \vec{n}}, \quad (51)$$

where $Z(\omega)$ is the local impedance on the domain boundaries. The system (50)-(51) is discretized using finite element formulation³⁶ as follows: to be able to handle complex geometries such as gas turbine combustors, the computational domain is decomposed in linear P1 elements (triangles in 2D, tetrahedra in 3D) and equations (50) and (51) are solved using a lumped mass matrix Galerkin finite element method (see Nicoud¹⁸). The discretized equation can be put in a matrix form:

$$[A]\{p'\} + \omega[B(\omega)]\{p'\} + \omega^2[C]\{p'\} = 0 \quad (52)$$

^gFor this example, the active effects of the flame on the pressure field are neglected^{9,36}

where $[B(\omega)]$ contains boundary conditions. The matrix problem (52) is a non-linear eigenvalue problem and is reformulated to be linear. It is then solved using a parallelized implementation of the Arnoldi method.³⁷ Several examples of its application have already been referenced^{15,16,18} and shown the accuracy of the solver.

Compared to Navier-Stokes solvers in the space-time domain, Helmholtz codes are faster and directly supply the frequency and structure of all acoustic modes. Moreover these codes can easily handle complex valued boundary conditions that vary with frequency, whereas it remains a difficulty in the time domain, especially in complex geometries, despite some developpements^{38–40} making use of discrete convolutions.

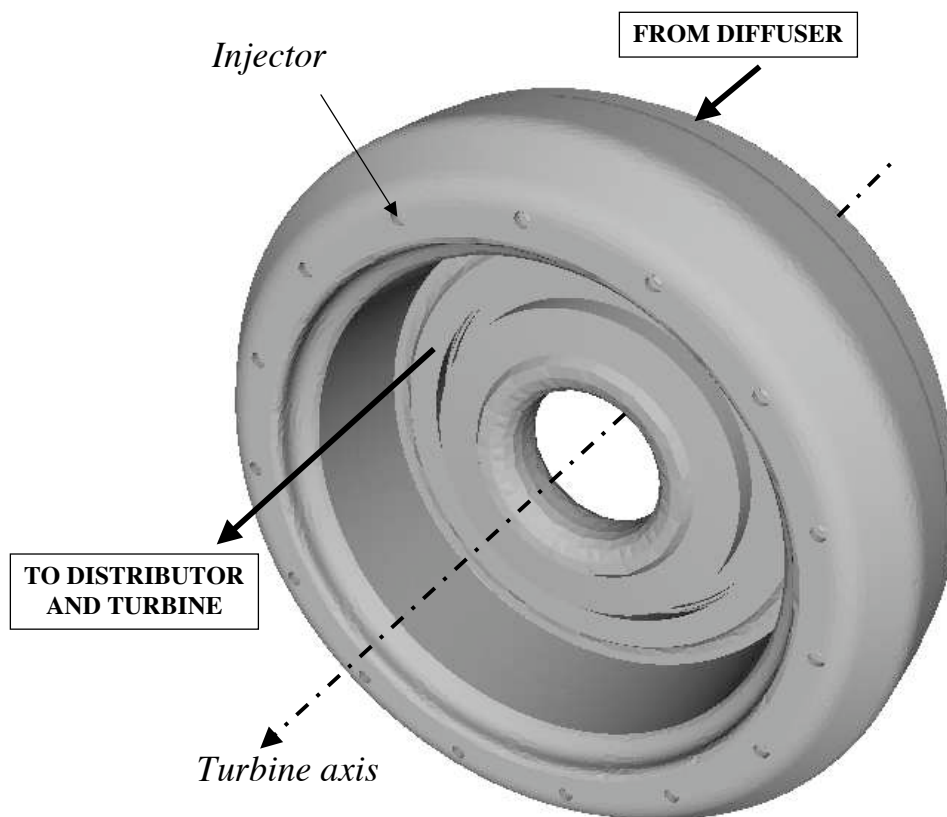


Figure 14. Geometry of the complete annular combustor.

As an example to show the influence of the boundary conditions, several calculations have been realized on a real annular combustor (see Fig. 14 and 15). In this configuration, both the chamber and its casing are considered and the swirler is also meshed. The only differences between the computations presented below are the acoustic boundary conditions at the chamber inlet and outlet (which are respectively fed by the diffuser and the distributor). The boundary conditions are either obtained using the analytical formulae of Table 1 or computed using the FD method of Section III.

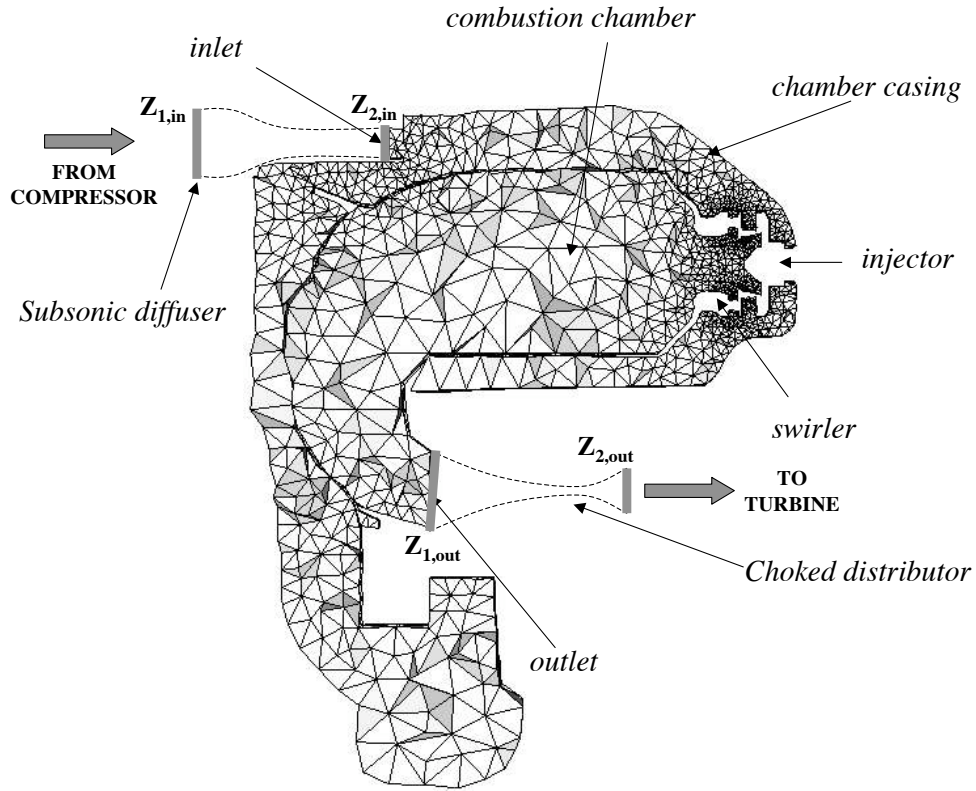


Figure 15. Cut of the mesh used for the acoustic eigenmodes calculation.

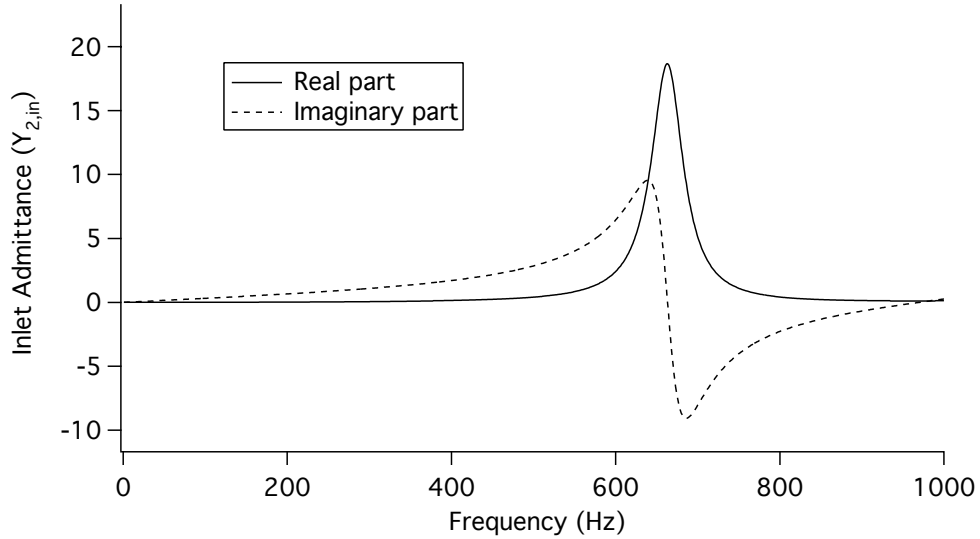


Figure 16. Reduced acoustic admittance $Y_{2,in} = 1/Z_{2,in}$ at the outlet of the diffuser.

For the diffuser, the boundary condition upstream of the throat is supposed to be either $Z_{1,in} = 0$ or $Y_{1,in} = 0$ (Fig. 15). For the distributor, the acoustic condition downstream of the nozzle correspond either to $Z_{2,out} = \infty$ or to a $Z_{2,out} = Z_*$ choked nozzle. The results of the Helmholtz code are limited here to the first mode (lowest frequency). Table 4 provides

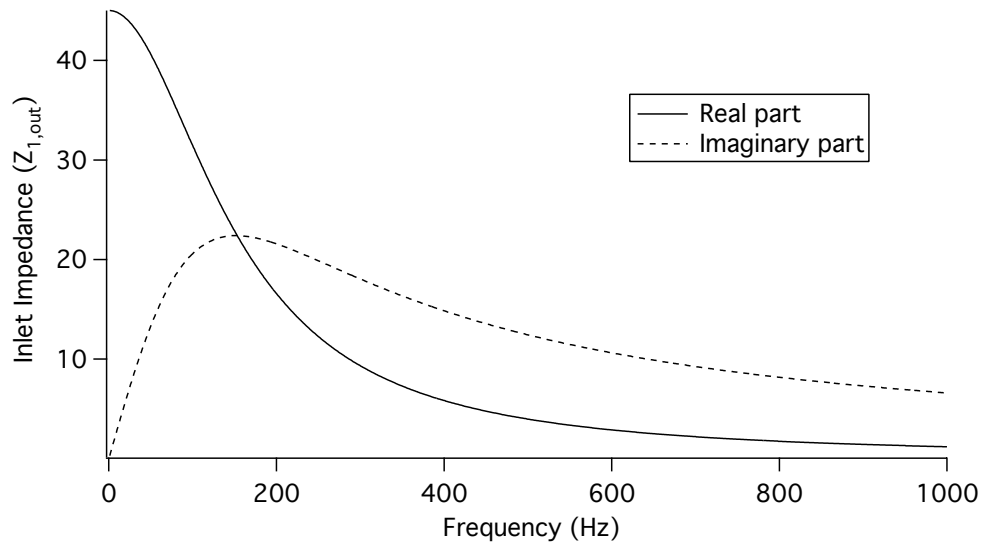


Figure 17. Reduced acoustic impedance $Z_{1,out}$ at the inlet of the distributor.

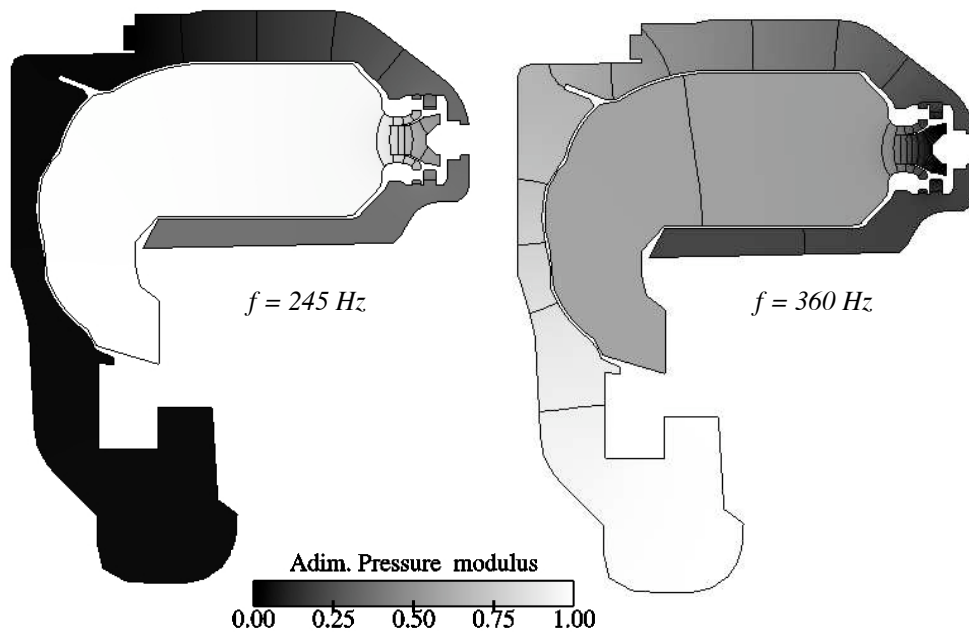


Figure 18. First longitudinal acoustic eigenmode for two different inlet boundary conditions . Left (case A): $p' = 0$ at the inlet and $u' = 0$ at the outlet. Right (case B): $u' = 0$ at the inlet and $u' = 0$ at the outlet.

the frequency of this first mode for each case. The structures of the modes (adimensionalized pressure modulus in the central plane of the chamber) are displayed in figures 18 and 19.

The results of the calculation illustrates the effects of impedances on the results:

- A comparison between Case A and B highlights the impact of the inlet boundary condition, on the diffuser side. Both the structure of the mode and its frequency (that has shifted from 245 to 360 Hz) are modified when the inlet impedance varies from 0 (Case A) to ∞ (Case B).

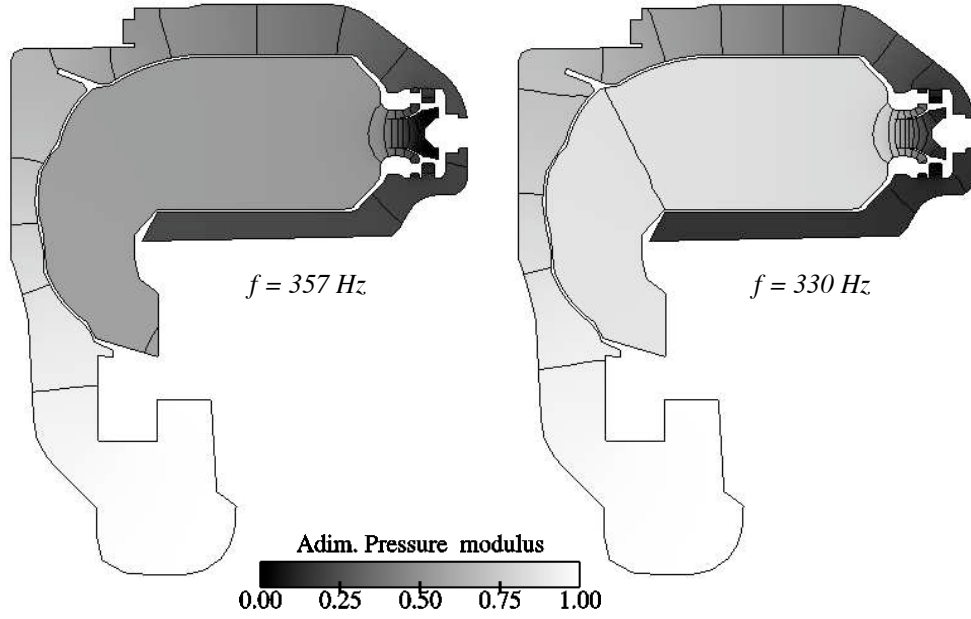


Figure 19. First longitudinal acoustic eigenmode for two different simulations . Left (Case C): $u' = 0$ at the inlet and $Z_{1,out}$ is given by the FD method at the outlet. Right (Case D): $Z_{2,in}$ at the inlet $Z_{1,out}$ at the outlet are both computed using the FD solver.

Cases	Inlet impedance $Z_{2,in}$	Outlet impedance $Z_{1,out}$	1 st mode frequency (Hz)
A	0 (Eq.(23) with $M_1 \approx M_2$ and $R_1 = -1$)	∞ (Eq.(15) with $M_1 \rightarrow 0$)	245
B	∞ (Eq.(23) with $M_1 \approx M_2$ and $R_1 = 1$)	∞ (Eq.(15) with $M_1 \rightarrow 0$)	360
C	∞ (Eq.(23) with $M_1 \approx M_2$ and $R_1 = 1$)	$Z_{1,out}$ (FD method)	357
D	$Z_{2,in}$ (FD method)	$Z_{1,out}$ (FD method)	330

Table 4. Frequencies of the 1st acoustic eigenmode and set of boundary conditions used for the calculations.

- The approximation of $u' = 0$ (infinite impedance) for the outlet to model a choked nozzle (case B) gives very similar results to the right acoustic impedance calculated using the FD solver (case C), at least for low frequencies.
- Analytical formulae or impedances given by the FD method (case D) should be preferred since the frequency and structure of the first mode depends strongly on their values.

VIII. Conclusion

To determine the acoustic eigenmodes of gas turbines combustors, Helmholtz solvers are a very interesting and commonly used method.^{5,7,8,17,18} This paper shows that their accuracy depends directly on the boundary conditions used for inlets and outlets. Some analytical expressions have been derived in the past,² extended here and shown to be efficient at low frequencies. In practical cases, they are not sufficient. A methodology to calculate those

acoustic boundary conditions, by approximating the ducts connected to the chamber as one dimensional nozzles and solving linearized Euler equations, has been presented and verified with different academic cases including a comparison with a full Euler solver. It enables the quick determination of inlet or outlet impedances of section varying ducts (choked or not) in the frequency domain. The application of this method in a realistic gas turbine chamber with a subsonic diffuser and a choked distributor has shown that even when the whole chamber is computed (including casing and swirlers), results still depend on the boundary condition used for the inlets and outlets. This means that a proper prediction of acoustic modes cannot be performed without these impedances. Results show that while impedances can be calculated on the distributor side where a choked nozzle is usually found, the problem is more complex for the inlet where diffusers are often unchoked and where a location to identify a proper acoustic boundary condition is difficult to find.

Acknowledgements

Financial support was supplied by Safran group. EM2C, C.Rey, O.Thual, F.Jaegle, M.Leyko, M.Myrczik, C.Sensiau and F.Nicoud are thanked for questions and discussions on theoretical backgrounds.

References

- ¹Tsien, H., "The transfer functions of rocket nozzles," *J. American Rocket Society*, Vol. 22, 1952, pp. 139–143.
- ²Marble, F. and Candel, S., "Acoustic disturbances from gas nonuniformities convected through a nozzle," *J. Sound Vibration*, Vol. 55, 1977, pp. 225–243.
- ³Candel, S., *Etudes Théoriques et Expérimentales de la Propagation Acoustique en Milieu Inhomogène et en Mouvement*, Ph.D. thesis, Université Paris VI, 1977.
- ⁴Lieuwen, T. and Yang, V., "Combustion Instabilities in Gas Turbine Engines. Operational Experience, Fundamental Mechanisms and Modeling," *Progress in Astronautics and Aeronautics AIAA*, Vol. 210, 2005.
- ⁵Culick, F., "Combustion instabilities in liquid-fueled propulsion systems- An overview," *AGARD 72B PEP meeting*, 1987.
- ⁶Crighton, D., Dowling, A., Ffowcs Williams, J., Heckl, M., and Leppington, F., *Modern methods in analytical acoustics*, Lecture Notes, Springer Verlag, New-York, 1992.
- ⁷Dowling, A., "The calculation of thermoacoustic oscillations," *J. Sound Vibration*, Vol. 180, No. 4, 1995, pp. 557–581.
- ⁸Polifke, W., Poncet, A., Paschereit, C., and Doebling, K., "Reconstruction of acoustic transfer matrices by instationnary computational fluid dynamics," *J. Sound Vibration*, Vol. 245, No. 3, 2001, pp. 483–510.
- ⁹Poinsot, T. and Veynante, D., *Theoretical and numerical combustion*, R.T. Edwards, 2nd edition., 2005.

- ¹⁰Colin, O., Ducros, F., Veynante, D., and Poinso, T., "A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion," *Phys. Fluids*, Vol. 12, No. 7, 2000, pp. 1843–1863.
- ¹¹Angelberger, C., Egolfopoulos, F., and Veynante, D., "Large Eddy Simulations of chemical and acoustic effects on combustion instabilities," *Flow Turb. and Combustion*, Vol. 65, No. 2, 2000, pp. 205–22.
- ¹²Pitsch, H. and Duchamp de la Geneste, L., "Large Eddy Simulation of Premixed Turbulent Combustion using a level-set approach," *Proc of the Comb. Institute*, Vol. 29, 2002, pp. 2001–2005.
- ¹³Pierce, C. and Moin, P., "Progress-variable approach for large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion," *J. Fluid Mech.*, Vol. 504, 2004, pp. 73–97.
- ¹⁴Roux, S., Lartigue, G., Poinso, T., Meier, U., and Bérat, C., "Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and Large Eddy Simulations," *Combust. Flame*, Vol. 141, 2005, pp. 40–54.
- ¹⁵Martin, C., Benoit, L., Sommerer, Y., Nicoud, F., and Poinso, T., "LES and acoustic analysis of combustion instability in a staged turbulent swirled combustor," *AIAA J.*, Vol. 44, No. 4, 2006, pp. 741–750.
- ¹⁶Selle, L., Benoit, L., Poinso, T., Nicoud, F., and Krebs, W., "Joint use of Compressible Large-Eddy Simulation and Helmholtz solvers for the analysis of rotating modes in an industrial swirled burner," *Combust. Flame*, Vol. 145, No. 1-2, 2006, pp. 194–205.
- ¹⁷Krebs, W., Walz, G., and Hoffmann, S., "Thermoacoustic analysis of annular combustor," *5th AIAA Aeroacoustics Conference*, edited by A. P. 99-1971, 1999.
- ¹⁸Nicoud, F., Benoit, L., and Sensiau, C., "Acoustic Modes in Combustors with Complex Impedances and Multidimensional Active Flames," *AIAA J.*, Vol. 45, 2007, pp. 426–441.
- ¹⁹Eldredge, J. D. and Dowling, A. P., "The absorption of axial acoustic waves by a perforated liner with bias flow," *J. Fluid Mech.*, Vol. 485, 2003, pp. 307–355.
- ²⁰Moase, W., Brear, M., and Manzie, C., "Linear and Nonlinear Acoustic Behaviour of Outlet Nozzles," *Proceedings of the Fifteenth Australasian Fluid Mechanics Conference (CD-ROM)*, edited by M. Behnia, W. Lin, , and G. D. McBain, No. AFMC00184, The University of Sydney, 2004.
- ²¹Rienstra, S., "A Small Strouhal Number Analysis for Acoustic Wave-Jet Flow-Pipe Interaction," *J. Sound Vibration*, Vol. 86, 1983, pp. 539–556.
- ²²Stow, S. R., Dowling, A. P., and Hynes, T. P., "Reflection of circumferential modes in a choked nozzle," *J. Fluid Mech.*, Vol. 467, 2002, pp. 215–239.
- ²³Moase, W., Brear, M., and Manzie, C., "The forced response of choked nozzles and supersonic diffusers," *J. Fluid Mech.*, Vol. *in press*, 2007.
- ²⁴Crocco, L., Monti, R., and Grey, J., "Verification of nozzle admittance theory by direct measurement of the admittance parameter," *J. American Rocket Society*, Vol. 31, 1961, pp. 771–775.
- ²⁵Sattelmayer, T., "Influence of the Combustor Aerodynamics On Combustion Instabilities from Equivalence Ratio Fluctuations," *ASME J. Eng. Gas Turbines and Power*, Vol. 125, 2003, pp. 11–19.
- ²⁶Mani, R., "Low-frequency sound propagation in a quasi-one-dimensional flow," *J. Fluid Mech.*, Vol. 104, 1981, pp. 81–92.
- ²⁷Ni, R., "A Multiple-Grid Scheme for Solving the Euler Equations," *AIAA J.*, Vol. 20, No. 11, 1982, pp. 1565–1571.
- ²⁸Schönfeld, T. and Rudyard, M., "Steady and Unsteady Flows Simulations Using the Hybrid Flow Solver AVBP," *AIAA J.*, Vol. 37, No. 11, 1999, pp. 1378–1385.
- ²⁹Thompson, K., *J. Comput. Phys.*, Vol. 89, 1990, pp. 439–461.

- ³⁰Poinsot, T. and Lele, S., “Boundary Conditions for Direct Simulation of Compressible Viscous Flows,” *J. Comput. Phys.*, Vol. 101, 1992, pp. 104–129.
- ³¹Kaufmann, A., Nicoud, F., and Poinsot, T., “Flow forcing techniques for numerical simulation of combustion instabilities,” *Combust. Flame*, Vol. 131, 2002, pp. 371–385.
- ³²Munjal, M., *Acoustics of Ducts and Mufflers*, John Wiley & Sons, 1986.
- ³³Mechel, F. P., Schiltz, W. M., and Dietz, J., “Akustische Impedanz einer Luftdurchströmten Öffnung,” *Acustica*, Vol. 15, 1965, pp. 199–206.
- ³⁴Nottin, C., *Large Eddy Simulation of combustion instabilities*, Ph.D. thesis, Ecole Centrale Paris, 2000.
- ³⁵Krebs, W., Walterskötter, R., Flohr, P., Walz, G., and Hoffmann, S., “Effect of burner design parameters on thermoacoustic stability of annular gas turbine combustors,” *Acoustics of Combustion*, edited by E. SEMINAR, Vol. 49, University of Twente, 2000.
- ³⁶Benoit, L., *Prédiction des instabilités thermo-acoustiques dans les turbines à gaz*, Phd thesis, University Montpellier II, 2005.
- ³⁷Lehoucq, R. and Sorensen, D., “ARPACK : Solution of Large Scale Eigenvalue Problems with Implicitly Restarted Arnoldi Methods. www.caam.rice.edu/software/ARPACK,” User’s guide, 1997.
- ³⁸Fung, K., Ju, H., and Tallapragada, B., “Impedance and Its Time-Domain Extensions,” *AIAA J.*, Vol. 38, No. 1, 2000, pp. 30–38.
- ³⁹Fung, K. and Ju, H., “Broadband Time-Domain Impedance Models,” *AIAA J.*, Vol. 39, No. 8, 2001, pp. 1449–1454.
- ⁴⁰Ju, H. and Fung, K., “Time-Domain Impedance Boundary Conditions with Mean Flow Effects,” *AIAA J.*, Vol. 39, No. 9, 2001, pp. 1683–1690.

Conclusions et perspectives

Conclusion

Dans cette thèse, on s'est intéressé aux méthodes numériques pour la LES d'écoulements diphasiques réactifs et aux conditions limites acoustiques dans les géométries complexes (comme les chambres de combustion des moteurs d'hélicoptère). La première partie de la thèse est un rappel des équations et des principaux modèles utilisés pour simuler la combustion turbulente et diphasique. On présente, dans un premier temps, le formalisme choisi pour représenter le mouvement d'agitation des gouttes (chapitre 1). Celui-ci repose sur une approche statistique permettant de décrire les brouillards de particules comme un milieu continu et fournir leurs propriétés Eulériennes mésoscopiques (fraction volumique, vitesses...). Le filtrage des équations de Navier-Stokes ainsi que celles de la phase dispersée est exposé. On fournit de plus les modèles de sous-maille et celui de la flamme épaissie.

La discrétisation des équations présentées auparavant (en particulier les termes de convection) fait l'objet de la deuxième partie. On décrit la formulation volumes finis *cell-vertex*. En outre, on démontre le lien étroit qui existe avec les éléments finis de Galerkin et d'autres formulations telles que les méthodes de distribution de résidus (chapitre 4). On évalue ensuite les performances des schémas de convection utilisés dans AVBP, en calculant leurs erreurs de troncature et coefficients d'amplification (chapitre 5). Cette étude permet, entre autres, de démontrer les excellentes qualités des schémas Taylor-Galerkin notamment en ce qui concerne l'erreur de phase, très faible quel que soit le CFL. Les expériences numériques classiques (convection linéaire d'une impulsion gaussienne, transport d'un vortex, onde acoustique monochromatique progressive) confirment les résultats théoriques. **Les schémas Taylor-Galerkin sont donc d'excellents candidats pour réaliser des LES et étudier les instabilités de combustion.** En revanche, bien qu'ils génèrent des erreurs de diffusion et de dispersion très faibles, ces schémas ne sont pas positifs. La conséquence est le manque de robustesse des calculs dès lors qu'il s'agit de convecter une grandeur physique qui doit absolument rester bornée, comme la fraction volumique de liquide (comprise entre 0 et 1) ou même la pression en cas d'écoulements fortement compressibles. La solution adoptée jusqu'ici et dans cette thèse pour assurer la stabilité de la méthode numérique est l'utilisation de viscosités artificielles de différentes natures (Von Neumann - Richtmeyer / Jameson). Des LES d'écoulements monophasiques non réactifs et diphasiques réactifs sur une configuration complexe (la chambre de combustion installée sur le banc d'essai MERCATO au centre du Fauga-Mauzac de l'ONERA) ont été réalisées et ont montré que cette solution ne donne pas entière satisfaction. **Dans le cas de la phase porteuse gazeuse, l'application de viscosité artificielle est locale et substantielle.** Les effets sont assez peu sensibles, ce qu'atteste une comparaison simple des ordres de grandeur des différentes viscosités (numérique, artificielle et physique). En revanche, les quantités de viscosité artificielle introduites dans la phase dispersée sont bien trop importantes sans pour

autant assurer la stabilité désirée. Les résultats présentés dans le chapitre 7 et les comparaisons avec les données expérimentales démontrent toutefois que **la formulation Euler-Euler permet d'obtenir une description assez fine des écoulements diphasiques turbulents et réactifs dans une chambre de combustion à géométrie complexe.**

Le chapitre 6 démontre l'importance de la prise en compte des schémas de bord et des conditions limites. Pour des phénomènes tels que la propagation d'ondes acoustiques, l'interaction avec les murs ou les entrées/sorties du domaine est déterminante. Or on montre dans ce chapitre que la précision des discrétisations aux bords peut dégrader considérablement les résultats. La prise en compte des termes de bord issus de la méthode Lax-Wendroff est en particulier critique pour la stabilité de la méthode. L'analyse numérique a été menée grâce à la méthode de la matrice d'amplification dont on donne une description complète et qui permet de tester *a priori* les modifications éventuelles qu'on pourrait apporter au code, ce qui constitue un gain de temps précieux.

La troisième et dernière partie est une étude détaillée des calculs d'impédances acoustiques en entrée et en sortie de conduits à section variable et dans lesquels l'écoulement est à Mach non nul. On présente et compare trois méthodes de déterminations différentes basées sur des approches et des hypothèses différentes, ainsi qu'un exemple d'application (calcul de modes propres d'un foyer aéronautique).

Perspectives

- ▷ *Méthodes numériques pour la phase porteuse* Les schémas actuels utilisés dans AVBP pour la description d'un écoulement monophasique turbulent sont satisfaisants. On peut toutefois envisager certaines améliorations : (1) Comme on l'a décrit au chapitre 6, l'utilisation de murs avec une décomposition en ondes caractéristiques stabilise le calcul. Néanmoins, dans le cas des schémas Taylor-Galerkin, la dissipation provoquée aux schémas de bord paraît excessive dans certains cas. Elle pourrait être réduite par l'amélioration de la précision aux limites du domaine de calcul, comme on l'a montré pour le schéma Lax-Wendroff. L'étude effectuée avec la méthode de la matrice pourrait donc être reproduite pour les schémas Taylor-Galerkin. (2) Le transport de scalaires passifs (pour des modèles de combustion comme CFM-LES, par exemple) et même des fractions massiques nécessite en principe d'utiliser un schéma positif (bien que cela soit moins critique que dans le cas de la fraction volumique de liquide). **Les méthodes FCT** ont cette qualité (théoriquement, cela n'est pas démontré mais en pratique les *overshoots* sont très rares), tout en gardant une précision très proche du schéma d'ordre élevé sur lequel elles sont construites (voir par exemple les résultats dans le chapitre 5).
- ▷ *Schémas de convection pour la phase dispersée* Bien que les résultats obtenus pour les vitesses moyennes des gouttes soient en accord avec les données expérimentales, il paraît plus intéressant de résoudre les équations de la phase dispersée avec des schémas de convection décentrés. **Du fait de leur lien avec les méthodes utilisées dans AVBP, les schémas *fluctuation splitting* semblent être une excellente alternative à la solution actuelle.** Des tests de convection scalaire ont été menés dans cette thèse et ont démontré que les techniques *fluctuation splitting* ont les qualités requises pour cette tâche car elles assurent robustesse et précision. Il reste donc à adapter et implanter ces schémas pour le système des équations de la phase dispersée.

- ▷ *Polydispersion* La structure de flamme obtenue dans cette thèse est intéressante mais il reste à prendre en compte les aspects polydisperses. On peut, à ce titre, se demander quelle influence peuvent avoir les petites gouttes (d'une dizaine de microns) sur la structure de la flamme. En effet, celles-ci sont susceptibles de s'évaporer beaucoup plus rapidement. De ce fait, des flammes de prémélange pourraient apparaître. Le modèle de brouillards polydisperses implanté actuellement dans AVBP permet une description fine de la dispersion des gouttes de différentes tailles mais manque de robustesse dès lors qu'il y a évaporation. Des méthodes telles que les descriptions "multi-fluides" ou DQMOM présentent, à ce titre, un grand intérêt. La première, en particulier, pourrait être intégrée assez rapidement dans AVBP.
- ▷ *Interaction gouttes / paroi* Il se forme souvent des films liquides sur les parois des chambres. A l'heure actuelle, aucun modèle de film liquide n'est implanté dans le code. Dans un cas comme MERCATO étudié ici, l'intérêt reste limité car d'après les visualisations expérimentales, la présence des films liquides n'est qu'intermittente. En revanche, dans des chambres de combustion réelles (aéronautiques ou dans un moteur automobile), les films peuvent être présents en permanence.

Bibliographie

- [1] ABALAKIN, I., DERVIEUX, A., AND KOZUBSKAYA. A vertex centered high order MUSCL scheme applying to linearised Euler acoustics. Tech. Rep. 4459, INRIA, 2002. 86, 94
- [2] ABGRALL, R. AND MARPEAU, F. Residual Distribution Schemes on Quadrilateral Meshes. *J. Sci. Comput.* 30, 1 (2007), 131–175. 103
- [3] ABGRALL, R. On Essentially Non-Oscillatory Schemes on Unstructured Meshes : Analysis and Implementation. *J. Comput. Phys.* 114, 1 (1994), 45–54. 87
- [4] ABGRALL, R. Toward the ultimate conservative scheme : following the quest. *J. Comput. Phys.* 167, 2 (2001), 277–315. 103
- [5] ABGRALL, R. Essentially non-oscillatory Residual Distribution schemes for hyperbolic problems. *J. Comput. Phys.* 214 (2006), 773–808. 103, 122, 178
- [6] ABGRALL, R., MER, K., AND NKONGA, B. A Lax–Wendroff type theorem for residual schemes. In *Proceeding of a conference for P.L. Roe’s 60th birthday* (2002), M.Hafez and J. Chattot, Eds., Wiley, pp. 243–266. 103
- [7] ABGRALL, R., AND ROE, P. High Order Fluctuation Schemes on Triangular Meshes. *J. Sci. Comput.* 19, 1-3 (2003), 3–36. 103, 108
- [8] ALLAIRE, G. *Analyse numérique et optimisation*. Les Editions de l’Ecole Polytechnique, 2006. 103, 139, 147, 148, 149, 153, 175, 197
- [9] A.N.BROOKS, AND HUGHES, T. Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations. *Comp. Meth. Appl. Mech. & Eng.* 32 (1982), 199–259. 87, 105, 110, 115
- [10] ANDERSON, J. *Modern Compressible Flow*. McGraw-Hill, New York, 1990. 47
- [11] ANGAARD, J. Méthodes de cell-vertex pour des maillages non structurés. Tech. Rep. STR/CFD/93/39, CERFACS, 1993. 100
- [12] ANGELBERGER, D., VEYNANTE, D., EGOLFOPOULOS, F., AND POINSOT, T. Large Eddy Simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Summer Program* (1998), Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., pp. 61–82. 54, 63
- [13] APTE, S. V., MAHESH, K., MOIN, P., AND OEFELEIN, J. C. Large-eddy simulation of swirling particle-laden flows in a coaxial-jet combustor. *Int. J. Mult. Flows* 29, 8 (2003), 1311–1331. 32
- [14] AUFRAY, V. *Etude comparative de schémas numériques pour la modélisation de phénomènes diffusifs sur maillages multiéléments*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. 81, 124
- [15] BAKER, A., CHAFFIN, D., IANNELLI, J., AND ROY, S. Finite Elements for CFD - How does the theory compare ? *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 31 (1999), 345–358. 115
- [16] BARTH, T. On Unstructured Grids and Solvers. In *Lectures Series 1990-03*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1990. 93

- [17] BARTH, T., AND JESPERSEN, D. The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes. *AIAA Paper*, 89-0366 (1989). 93
- [18] BAUM, M., POINSOT, T. J., AND THÉVENIN, D. Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows. *J. Comput. Phys.* 116 (1994), 247–261. 128, 140, 153, 167
- [19] BENOIT, L. *Prédiction des instabilités thermo-acoustiques dans les turbines à gaz*. Phd thesis, University Montpellier II, 2005. 276
- [20] BIRD, R., STEWART, W., AND LIGHFOOT, E. *Transport phenomena*. John Wiley, New York, 1960. 52
- [21] BOILEAU, M. *Simulation aux grandes échelles de l’allumage diphasique des foyers aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. 68, 69, 70, 71, 121, 258
- [22] BOILEAU, M., PASCAUD, S., RIBER, E., CUENOT, B., GICQUEL, L., AND POINSOT, T. Large eddy simulation of spray combustion in gas turbines. *Submitted to Flow Turb. and Combustion* (2007). 213
- [23] BORCHI, R., AND DESTRIAU, M. *La Combustion et les flammes*. Editions TECHNIP, 1995. 21
- [24] CALO, V. *Residual-Based Multiscale Turbulence Modeling : Finite Volume Simulations of Bypass Transition*. PhD thesis, Stanford University, 2004. 87
- [25] CAMARRI, S., SALVETTI, M., DERVIEUX, A., AND KOOBUS, B. A low diffusion MUSCL scheme for LES on unstructured grids. Tech. Rep. 4512, INRIA, 2002. 86, 94
- [26] CANDEL, S. *Etudes Théoriques et Expérimentales de la Propagation Acoustique en Milieu Inhomogène et en Mouvement*. PhD thesis, Université Paris VI, 1977. 276
- [27] CANUTO, C., HUSSAINI, M., QUARTERONI, A., AND ZANG, T. *Spectral Methods in Fluid Dynamics*, 2nd ed. Springer Verlag, Berlin and New York, 1990. 84
- [28] CARAENI, D., AND FUCHS, L. Compact Third-Order Multidimensional Upwind Scheme for Navier-Stokes Simulations. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 15 (2002), 373–401. 86
- [29] CARAENI, M. *Developing Computational Tools for Modern Aeroacoustic Research*. PhD thesis, Lund Institute of Technology, November 2003. 86
- [30] CARPENTER, M., GOTTLIEB, D., AND ABARBANEL, S. The Stability of Numerical Boundary Treatments for Compact High-Order Finite-Difference Schemes. *J. Comput. Phys.* 108 (1993), 272–295. 137, 191
- [31] CARPENTIER, R. Comparaison entre des schémas 2D de type Roe sur un maillage régulier de triangle ou quadrangle. I : calcul au sommet - pentes centrées. Tech. Rep. 2824, INRIA, 1996. 93, 94
- [32] CARPENTIER, R. Comparaison entre des schémas 2D de type Roe sur un maillage régulier de triangle ou quadrangle. II : calcul au sommet - Le $\beta\gamma$. Tech. Rep. 3360, INRIA, 1998. 93, 94
- [33] CARPENTIER, R., BOURDONNAYE, A. D. L., AND LARROUTUROU, B. Sur le calcul des équations équivalentes pour l’analyse des méthodes numériques linéaires. *C.R. Acad. Sci.* 319, 1 (1994), 757–786. 155
- [34] CATALANO, L., PALMA, P. D., NAPOLITANO, M., AND PASCAZIO, G. Cell-Vertex Adaptive Euler Method for Cascade Flows. *AIAA Journal* 33, 12 (December 1995), 2299–2304. 94
- [35] CATHERS, B., AND S.BATES. Spurious Numerical Refraction. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 21, 11 (1995), 1049–1066. 167

- [36] CHAKRAVARTHY, V., AND MENON, S. Subgrid Modeling of Turbulent Premixed Flames in the Flamelet Regime. *Flow Turb. and Combustion* 65 (2000), 133–161. 213
- [37] CHANG, S. A critical analysis of the modified equation technique of Warming and Hyett. *J. Comput. Phys.* 86 (1990), 107–126. 155
- [38] CHAO, Y. Recirculation Structure of the Coannular Swirling Jets in a Combustor. *AIAA Journal* 26, 5 (1988), 623–625. 222, 223
- [39] CHARLETTE, F., VEYNANTE, D., AND MENEVEAU, C. A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part I - non-dynamic formulation and initial tests. *Combust. Flame* 131 (2002), 159–180. 64
- [40] CHASSAING, P. *Turbulence en mécanique des fluides, analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur*. Cépaduès-éditions, Toulouse, France, 2000. 56
- [41] CHICKOS, J. S., HILLESHEIM, D., AND NICHOLS, G. The enthalpies of vaporization and sublimation of exo- and endo-tetrahydrodicyclopentadienes at $T = 298.15$ K. *J. Chem. Thermodynamics* 34, 10 (December 2002), 1647–1658. 248
- [42] COCKBURN, B., AND SHU, C. Runge-Kutta Discontinuous Galerkin Methods for Convection-Dominated Problems. *J. Sci. Comput.* 16, 3 (2001), 173–261. 87
- [43] COELLO, C. Twenty years of Evolutionary Multiobjective Optimization : A Historical View of the Field. *IEEE Computational Intelligence Magazine* 1, 2006 (2006), 28–36. 334
- [44] COLIN, O. *Simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée dans les statoréacteurs*. PhD thesis, INP Toulouse, 2000. 54, 131, 132, 133, 143, 220
- [45] COLIN, O. A finite element operator for diffusion terms in AVBP. Tech. rep., Institut Français du Pétrole, 2003. 124, 125
- [46] COLIN, O., DUCROS, F., VEYNANTE, D., AND POINSOT, T. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids* 12, 7 (2000), 1843–1863. 62, 63, 64
- [47] COLIN, O., AND RUDGYARD, M. Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.* 162, 2 (2000), 338–371. 26, 117, 118, 119, 120, 121, 160, 161, 162, 165, 169, 187, 331, 333, 334, 335, 336, 339
- [48] COLONIUS, T. Numerically nonreflecting boundary and interface conditions for compressible flow and aeroacoustic computations. *AIAA Journal* 35, 7 (1997), 1126–1133. 140
- [49] COLONIUS, T., LELE, S., AND MOIN, P. Boundary conditions for direct computation of aerodynamic sound generation. *AIAA Journal* 31, 9 (1993), 1574–1582. 140
- [50] COLONIUS, T., AND LELE, S. K. Computational aeroacoustics : progress on nonlinear problems of sound generation. *Progress in Aerospace Sciences* 40, 6 (2004), 345–416. 140
- [51] COOK, A., AND CABOT, W. Hyperviscosity for Shock-Turbulence Interactions. *J. Comput. Phys.* 203 (2005), 379–385. 86, 136
- [52] COUDERC, F. *Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 2007. 243
- [53] CROWE, C., SOMMERFELD, M., AND TSUJI, Y. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press LLC, 1998. 32
- [54] CRUMPTON, P. An efficient cell vertex method for unstructured tetrahedral grids. Tech. Rep. 95/19, Oxford University Computing Laboratory, 1995. 91, 93, 131

- [55] CRUMPTON, P. I., MACKENZIE, J. A., AND MORTON, K. W. Cell vertex algorithms for the compressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.* 109 (1993), 1–15. 91, 92, 95, 101, 111, 112, 122
- [56] CUENOT, B., JIMENEZ, C., AND POINSOT, T. Direct Numerical Simulation of turbulent partially premixed flames. In *Ninth Conference (Int.) on Numerical Combustion* (Sorrento, Italy, 2002), SIAM, Ed., vol. 1, pp. 177–178. 82
- [57] DE CHAISEMARTIN, S., F.LAURENT, MASSOT, M., AND RÉVEILLON, J. Evaluation of Eulerian multi-fluid versus Lagrangian methods for ejection of polydisperse evaporating sprays by vortices. *submitted to Journal of Computational Physics* (2007). 44
- [58] DEB, K., PRATAP, A., AGARWAL, S., AND MEYRIVAN, T. A Fast and Elitist Multi-objective Genetic Algorithm : NSGA-II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* 6, 2 (2002), 182–197. 334
- [59] DECONINCK, H., R.STRUJIS, AND ROE, P. Fluctuation splitting for multidimensional convection problems : an alternative to finite volume and finite element methods. In *Lecture Series 1990-03*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1990. 105, 110
- [60] DECONINCK, H., SERMEUS, K., AND ABGRALL, R. Status of Multidimensional Upwind Residual Distribution Schemes and Applications in Aeronautics. In *Fluids 2000 Conference and Exhibit, Denver* (2000), no. AIAA paper 2000-2328. 103, 114, 126
- [61] DESJARDINS, O., FOX, R. O., AND VILLEDIEU, P. A quadrature-based moment closure for the Williams spray equation. In *Proc. of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2006, pp. 223–234. 45, 121
- [62] DONEA, J. A Taylor-Galerkin method for convective transport problems. *Int. J. for Num. Meth. in Fluids* 20 (1984), 101–119. 114, 115, 119, 331, 335
- [63] DONEA, J., QUARTAPELLE, L., AND SELMIN, V. An analysis of time discretization in the finite element solution of hyperbolic problems. *J. Comput. Phys.* 70 (1987), 463–499. 114, 115, 116, 155, 169, 171, 335
- [64] DUCHAINE, F. *Optimisation de Forme Multi-Objectif sur Machines Parallèles avec Méta-Modèles et Coupleurs. Application aux Chambres de Combustion Aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. 333
- [65] DUCRUIX, S., SCHULLER, T., DUROX, D., AND S.CANDEL. Combustion Instability Mechanisms in Premixed Combustors. In *Combustion Instabilities in Gas Turbine Engines. Operational Experience, Fundamental Mechanisms and Modeling*. AIAA, 2005, ch. 9, pp. 179–207. 276
- [66] ELGHOBASHI, S., AND TRUESDELL, G. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. *Phys. Fluids* 5, 7 (1993), 1790–1801. 32
- [67] ERLEBACHER, G., HUSSAINI, M. Y., SPEZIALE, C. G., AND ZANG, T. A. Toward the large-eddy simulation of compressible turbulent flows. *J. Fluid Mech.* 238 (1992), 155–185. 62
- [68] FERZIGER, J., AND PERIĆ, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1997. 86
- [69] FÉVRIER, P. *Etude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesses de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire*. PhD thesis, INP Toulouse, 2000. 31, 44
- [70] FÉVRIER, P., AND SIMONIN, O. Statistical and Continuum Modelling of Turbulent Reactive Particulate Flows. Part 2 : Application of a Two-Phase Second-Moment Transport Model For Prediction of Turbulent Gas-Particle Flows. In *Theoretical and Experimental Modeling of Particulate*

- Flows, Lecture Series 2000-06, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Rhode Saint Genese (Belgium)* (2000). 34, 43
- [71] FÉVRIER, P., SIMONIN, O., AND SQUIRES, K. Partitioning of Particle Velocities in Gas-Solid Turbulent Flows into a Continuous Field and a Spatially Uncorrelated Random Distribution : Theoretical Formalism and Numerical Study. *J. Fluid Mech.* 533 (2005), 1–46. 34
 - [72] FEZOU, L. Résolution des équations d'Euler par un schéma de Van Leer en éléments finis. Tech. Rep. 1985, INRIA, 1985. 93
 - [73] FIORINA, B., AND LELE, S. An artificial nonlinear diffusivity method for supersonic reacting flows with shocks. *J. Comput. Phys.* 222, 1 (2007), 246–264. 86
 - [74] F.LACAS. Spray Combustion. In *Lectures Series 2005-02*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2005. 20, 21, 22
 - [75] FLETCHER, C. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, 2nd ed., vol. 1. Springer, 1991. 112, 175
 - [76] FUNG, K., JU, H., AND TALLAPRAGADA, B. Impedance and Its Time-Domain Extensions. *AIAA Journal* 38, 1 (2000), 30–38. 275
 - [77] FUREBY, C., AND GRINSTEIN, F. Monotonically Integrated Large-Eddy Simulation of Free Shear Flows. *AIAA Journal* 37, 5 (1999), 544–556. 60, 87
 - [78] FUREBY, C., AND GRINSTEIN, F. Large Eddy Simulation of High-Reynolds-Number Free and Wall-Bounded Flows. *J. Comput. Phys.* 181 (2002), 68–97. 60, 87
 - [79] GALLANT, R. W., AND YAWS, C. L. *Physical properties of hydrocarbons and other chemicals*, vol. 3. Gulf Publishing Company, 1993. 248
 - [80] GALLEY, D. *Etude de la stabilisation de flammes turbulentes pré vaporisées pauvres*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2006. 222
 - [81] GARCÍA, M., SOMMERER, Y., SCHÖNFELD, T., AND POINSOT, T. Evaluation of Euler/Euler and Euler/Lagrange Strategies for Large Eddy Simulations of Turbulent Reacting Flows. In *EC-COMAS Thematic Conference on Computational Combustion* (2005). 32
 - [82] GERMANO, M. A proposal for a redefinition of the turbulent stresses in the filtered Navier-Stokes equations. *Phys. Fluids* 29, 7 (1986), 2323–2324. 61
 - [83] GERMANO, M. Differential filters for large eddy simulation of turbulent flows. *Phys. Fluids* 29, 6 (1986), 1755–1756. 61
 - [84] GERMANO, M. Differential filters of elliptic type. *Phys. Fluids* 29, 6 (1986), 1757–1758. 61
 - [85] GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P., AND CABOT, W. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids* 3, 7 (1991), 1760–1765. 61, 62
 - [86] GIAUQUE, A. *Fonctions de transfert de flamme et énergies des perturbations dans les écoulements réactifs*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. 18, 275
 - [87] GIAUQUE, A., SELLE, L., POINSOT, T., BUECHNER, H., KAUFMANN, P., AND KREBS, W. System identification of a large-scale swirled partially premixed combustor using LES and measurements. *J. Turb.* 6, 21 (2005), 1–20. 18
 - [88] GILES, M. Non-reflecting boundary conditions for Euler equation calculations. *AIAA Journal* 28, 12 (1990), 2050–2058. 141
 - [89] GILES, M. UNSFLO : A Numerical Method For The Calculation Of Unsteady Flow In Turbomachinery. Tech. Rep. GTL 205, MIT - Gas Turbine Laboratory, 1991. 101

- [90] GODUNOV, S. A finite difference method for the numerical computation of discontinuous solution of the equations of gas dynamics. *Mat. Sb.* (1959). 86
- [91] HALL, M. Cell vertex multigrid solution of the Euler equations for transonic flow past aerofoils. Tech. rep., Royal Aerospace Establishment, 1984. 94, 101
- [92] HAM, F., APTE, S. V., IACCARINO, G., WU, X., HERRMANN, M., CONSTANTINESCU, G., MAHESH, K., AND MOIN, P. Unstructured LES of reacting multiphase flows in realistic gas turbine combustors. In *Annual Research Briefs - Center for Turbulence Research*. NASA Ames/Stanford Univ., 2003. 32, 213
- [93] HAM, F., AND IACCARINO, G. Energy conservation in collocated discretization schemes on unstructured meshes. In *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2004, pp. 3–14. 85
- [94] HAM, F., LIEN, F., AND STRONG, A. A Fully Conservative Second-Order Finite Difference Scheme for Incompressible Flow on Nonuniform Grids. *J. Comput. Phys.* 177 (2002), 117–133. 83, 85
- [95] HAM, F., MATTSON, K., AND IACCARINO, G. Accurate and stable finite volume operators for unstructured flow solvers. In *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2006. 85
- [96] HARLOW, F., AND WELCH, J. Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface. *Phys. Fluids* 8, 12 (1965), 2182–2189. 83
- [97] HARTEN, A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *J. Comput. Phys.* 135 (1997), 260–278. 86
- [98] HERRMANN, M., BLANQUART, G., AND RAMAN, V. Flux Corrected Finite Volume Scheme for Preserving Scalar Boundedness in Reacting Large-Eddy Simulations. *AIAA Journal* 44, 12 (2006), 2879–2886. 86
- [99] HICKEN, J., HAM, F., J.MILITZER, AND M.KOKSAL. A shift transformation for fully conservative methods : turbulence simulation on complex, unstructured grids. *J. Comput. Phys.* 208 (2005), 704–734. 85
- [100] HIRSCH, C. *Numerical Computation of internal and external flows : Fundamentals of Numerical Discretization*, vol. 1. John Wiley & Sons, New York, 1988. 47, 80, 92, 108, 111, 127, 128, 147, 149, 151, 152, 153, 154, 155, 156, 157, 167, 170, 197, 198, 240
- [101] HIRSCH, C. *Numerical Computation of internal and external flows : Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*, vol. 2. John Wiley & Sons, New York, 1990. 40, 131, 136, 141, 142
- [102] HIRSCHFELDER, CURTIS, AND BIRD. *Molecular Theory of Gases and Liquids*, 1954 ed. John Wiley & Sons, 1954. 52
- [103] HUBBARD, M., AND ROE, P. Multidimensional Upwind Fluctuation Distribution Schemes for Scalar Time Dependant Problems. Tech. Rep. 1/98, University of Reading, Department of Mathematics, 1998. 110, 111, 121, 122
- [104] HUBBARD, M. E., AND ROE, P. L. Compact high-resolution algorithms for time-dependent advection on unstructured grids. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 33, 5 (2000), 711–736. 122, 188
- [105] HUSSAIN, F., AND JEONG, J. On the identification of a vortex. *J. Fluid Mech.* 285 (1995), 69–94. 228
- [106] JAMESON, A., AND MAVRIPLIS, D. Finite Volume Solution of the Two-Dimensional Euler on a Regular Triangular Mesh. *AIAA Journal* 24, 4 (1986), 611–618. 92

-
- [107] JAMESON, A., SCHMIDT, W., AND TURKEL, E. Numerical Solution of the Euler Squations by Finite Volume Methods using Runge-Kutta Time Stepping Schemes. In *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference* (Palo Alto, 1981), A. p. 81-1259, Ed. 92, 93, 101, 128, 131, 132, 134, 186
 - [108] JOHNSON, C. The Streamline Diffusion Finite Element Method for Compressible and Incompressible Fluid Flow. In *Lectures Series 1990-03*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1990. 87
 - [109] KAUFMANN, A. *Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler/Euler des écoulements réactifs diphasiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004. 31, 33, 39, 40, 44, 71, 86, 121, 188
 - [110] KAUFMANN, A., NICLOUD, F., AND POINSOT, T. Flow forcing techniques for numerical simulation of combustion instabilities. *Combust. Flame* 131 (2002), 371–385. 276
 - [111] KIM, J., AND MOIN, P. Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.* 59, 2 (1985), 308–323. 139
 - [112] KOLMOGOROV, A. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. *C.R. Acad. Sci. USSR* 30 (1941), 301. 60
 - [113] KOOBUS, B., AND FAHRAT, C. Finite Volume/Element Discretization on Unstructured Meshes of the Multiscale Formulation of the Large Eddy-Simulation Method and Application to Vortex Shedding. Tech. Rep. 4722, INRIA, 2003. 86, 94
 - [114] KREISS, H.-O., AND SCHERER, G. Finite element and finite difference methods for hyperbolic partial differential equations. In *Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations*. Academic Press, 1974. 83
 - [115] KUO, K. *Principles of Combustion*. John Wiley, New York, 1986. 53, 258
 - [116] LARTIGUE, G. *Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004. 85, 86, 213, 214, 241
 - [117] LAVEDRINE, J. *Simulation aux grandes échelles de l'écoulement diphasique dans des modèles d'injecteur de moteurs aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, prévue pour 2008. 121
 - [118] LAX, P., AND WENDROFF, B. Difference Schemes for Hyperbolic Equations with High Order of Accuracy. *Commun. Pure Appl. Math.* 17 (1964), 381–398. 101
 - [119] LAX, P. D., AND WENDROFF, B. Systems of conservation laws. *Comm. Pure Appl. Math.* 13 (1960), 217–237. 101, 115, 127, 335
 - [120] LE, H., AND MOIN, P. An improvement of fractional step methods for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.* 92 (1991), 369–379. 139
 - [121] LEFEBVRE, A. *Atomization and Sprays*. Taylor & Francis, 1989. 19, 20, 243, 258
 - [122] LÉGIER, J.-P. *Simulations numériques des instabilités de combustion dans les foyers aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2001. 54
 - [123] LÉGIER, J.-P., POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. Dynamically thickened flame Large Eddy Simulation model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Summer Program 2000* (Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2000), pp. 157–168. 54, 65, 248
 - [124] LEIBOVICH, S. Vortex Stability and Breakdown : Survey and Extension. *AIAA Journal* 22, 9 (1984), 1192–1206. 222
 - [125] LELE, S. Compact finite difference schemes with spectral like resolution. *J. Comput. Phys.* 103 (1992), 16–42. 82, 163

- [126] LERICHE, R., SCHOENAUER, M., AND SEBA, M. *Modélisation Numérique : Défis et Perspectives*. Hermès, 2007, ch. Un État des Lieux de l’Optimisation Évolutionnaire et de ses Implications en Sciences pour l’Ingénieur. 334
- [127] LEVEQUE, R. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser Verlag, 1992. 149
- [128] LI, S., VARATHARAJAN, B., AND WILLIAMS, F. Chemistry of JP-10 Ignition. *AIAA Journal* 39, 12 (2001), 2351–2356. 247, 248
- [129] LIEUWEN, T., AND YANG, V. Combustion Instabilities in Gas Turbine Engines. Operational Experience, Fundamental Mechanisms and Modeling. In *Progress in Astronautics and Aeronautics AIAA* (2005), vol. 210. 218
- [130] LIDTHILL, J. *Waves in Fluids*. Cambridge University Press, 1978. 151, 167
- [131] LILLY, D. The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. In *Proceedings of the IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences* (Yorktown Heights, USA, 1967). 61
- [132] LILLY, D. K. A proposed modification of the germano sub-grid closure method. *Phys. Fluids A4*, 3 (3 1992), 633–635. 62
- [133] M. MYRCZIK. Determination of the inlet impedances for acoustic eigenmode computation in combustion chambers. Tech. rep., ENSICA, 2006. 276
- [134] MACKENZIE, J. *Cell vertex finite volume methods for the solution of the compressible Navier-Stokes equations*. PhD thesis, Oxford University Computing Laboratory, 1991. 91, 94
- [135] MAHESH, K., CONSTANTINESCU, G., AND MOIN, P. A numerical method for large-eddy simulation in complex geometries. *J. Comput. Phys.* 197, 1 (2004), 215–240. 85
- [136] MARBLE, F., AND CANDEL, S. Acoustic disturbances from gas nonuniformities convected through a nozzle. *J. Sound Vib.* 55 (1977), 225–243. 276
- [137] MARTIN, C. *Etude énergétique des instabilités thermo-acoustiques et optimisation génétique des cinétiques réduites*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 18, 241
- [138] MARTIN, C., BENOIT, L., SOMMERER, Y., NICOUD, F., AND POINSOT, T. LES and acoustic analysis of combustion instability in a staged turbulent swirled combustor. *AIAA Journal* 44, 4 (2006), 741–750. 18, 275
- [139] MAVRIPLIS, D., AND JAMESON, A. Multigrid Solution of the Navier-Stokes Equations on Triangular Meshes. *AIAA Journal* 28, 8 (1990), 1415–1425. 93, 101
- [140] MAXEY, M., AND RILEY, J. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Phys. Fluids* 26, 4 (1983). 31
- [141] MENEVEAU, C., AND POINSOT, T. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combust. Flame* 86 (1991), 311–332. 63
- [142] MENON, S., AND N., P. Subgrid modeling for simulation of spray combustion in large scale combustors. *AIAA Journal* 44, 709-723 (2006). 213
- [143] MEZINE, M., RICCHIUTO, M., ABGRALL, R., AND DECONINCK, H. Monotone and stable residual distribution schemes on prismatic space-time elements for unsteady conservation laws. In *Lectures Series 2003-05*, V. K. I. for Fluid Dynamics, Ed., vol. Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2003. 103, 105, 107, 108, 110, 122
- [144] MITTAL, R., AND MOIN, P. Suitability of upwind-biased finite difference schemes for large eddy simulation of turbulent flows. *AIAA Journal* 35, 8 (1997), 1415–1417. 82

- [145] MOIN, P., SQUIRES, K., CABOT, W., AND LEE, S. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids A* 3, 11 (1991), 2746–2757. 60, 62
- [146] MOREAU, M. *Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. 37, 40, 68, 121
- [147] MOREAU, M., BEDAT, B., AND SIMONIN, O. From Euler-Lagrange to Euler-Euler Large Eddy Simulation Approaches for Gas-Particle Turbulent Flows. In *ASME Fluids Engineering Summer Conference* (2005), ASME FED. 32, 70
- [148] MORINISHI, Y., LUND, T., VASILYEV, O., AND MOIN, P. Fully Conservative Higher Order Finite Difference Schemes for Incompressible Flow. *J. Comput. Phys.* 143 (1998), 90–124. 83
- [149] MORINISHI, Y., VASILYEV, O., AND OGI, T. Fully conservative finite difference scheme in cylindrical coordinates for incompressible flow simulations. *J. Comput. Phys.* 197 (2004), 686–710. 83
- [150] MORTON, K. Finite Volume and Finite Element Methods for the Steady Euler Equations of Gas Dynamics. In *The Mathematics of Finite Elements and Applications VI : MAFELAP 1987*. J.R. Whiteman, 1988, pp. 353–378. 94, 101, 102
- [151] MORTON, K., AND PAISLEY, M. A Finite Volume Scheme with Shock Fitting for the Steady Euler Equations. *J. Comput. Phys.* 80 (1989), 168–203. 93
- [152] MORTON, K., AND PARROTT, A. K. Generalized Galerkin Methods for First-Order Hyperbolic Equations. *J. Comput. Phys.* 36 (1980), 249–270. 115, 116
- [153] MORTON, K., STYNES, M., AND SÜLI, E. Analysis of a cell-vertex finite volume method for convection-diffusion problems. *Mathematics of Computation* 66, 220 (1997), 1389–1406. 94, 108
- [154] MOSSA, J.-B. *Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 44, 213
- [155] MOUREAU, V. *Simulation aux grandes échelles de l’aérodynamique interne des moteurs à piston*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2004. 60
- [156] MOUREAU, V., LARTIGUE, G., SOMMERER, Y., ANGELBERGER, C., COLIN, O., AND POINSOT, T. Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys.* 202, 2 (2004), 710–736. 121, 140
- [157] MOUREAU, V., VASILYEV, O., ANGELBERGER, C., AND POINSOT, T. Commutation errors in Large Eddy Simulations on moving grids. Application to piston engine flows. In *Proceeding of the Summer program* (Center for Turbulence Research, NASA AMES/Stanford University, USA, 2004), pp. 157–168. 60, 62
- [158] NI, R.-H. A multiple grid scheme for solving the Euler equations. *AIAA Journal* 20 (1982), 1565–1571. 94, 101
- [159] NICOUD, F. Defining wave amplitude in characteristic boundary conditions. *J. Comput. Phys.* 149 (1998), pp 418–422. 140, 141
- [160] NICOUD, F., BENOIT, L., AND SENSIAU, C. Acoustic Modes in Combustors with Complex Impedances and Multidimensional Active Flames. *AIAA Journal* 45 (2007), 426–441. 25
- [161] NICOUD, F., AND DUCROS, F. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow Turb. and Combustion* 62, 3 (1999), 183–200. 86
- [162] NICOUD, F., AND POINSOT, T. DNS of a channel flow with variable properties. In *Int. Symp. On Turbulence and Shear Flow Phenomena*. (Santa Barbara, Sept 12–15., 1999). 62

- [163] NICOUD, F., AND POINSOT, T. Boundary conditions for compressible unsteady flows. In *Absorbing Boundaries and Layers, Domain Decomposition Methods. Applications to Large Scale Computation*, L. Tourrette and L. Halpern, Eds. Editions Novascience, New-York, 2001. 141
- [164] NOTTIN, C. *Large Eddy Simulation of combustion instabilities*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2000. 276
- [165] ORAN, E., AND BORIS, J. *Numerical Simulation of Reactive Flow*. Elsevier, 1987. 79, 86, 122, 131, 164
- [166] PAISLEY, M. *Finite Volume Methods for the Steady Euler Equations*. PhD thesis, Oxford University Computing Laboratory, 1986. 91
- [167] PAOLI, R., POINSOT, T., AND SHARIFF, K. Testing semi-Lagrangian schemes for two-phase flow applications. In *Proceeding of the Summer program* (2006), Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 33
- [168] PARETO, V. *Manuale di Economia Politica*. Piccola Biblioteca Scientifica, Milan, 1906. 334
- [169] PARK, N., AND MAHESH, K. Numerical and modelling issues in LES of compressible turbulence on unstructured grids. *AIAA Paper*, 2007-722 (2007). 85
- [170] PASCAUD, S. *Vers la simulation aux grandes échelles des écoulements turbulents diphasiques réactifs : application aux foyers aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. 121, 269
- [171] PASCAUD, S., BOILEAU, M., MARTINEZ, L., CUENOT, B., AND POINSOT, T. LES of steady spray flame and ignition sequences in aeronautical combustors. In *1st workshop INCA* (SNECMA, Villaroche, France, 2005), pp. 19–26. 213
- [172] PIERCE, C. *Progress-Variable Approach for Large-Eddy Simulation of Turbulent Combustion*. PhD thesis, Stanford University, 2001. 84, 85, 86, 213
- [173] PIOMELLI, U., AND BALARAS, E. Wall-Layer Models for Large-Eddy Simulations. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 34 (2002), 349–374. 143
- [174] POINSOT, T., AND HAWORTH, D. DNS and modelling of the interaction between turbulent premixed flames and walls. In *Proc. of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1992, pp. 307–324. 82
- [175] POINSOT, T., AND LELE, S. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.* 101, 1 (1992), 104–129. 140, 141, 142
- [176] POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition., 2005. 17, 51, 54, 56, 58, 63, 196, 217, 263, 276
- [177] POPE, S. Stochastic Lagrangian models of velocity in homogeneous turbulent shear flow. *Phys. of Fluids* 14(5) (2002), 1696–1702. 56
- [178] POPE, S. B. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000. 237
- [179] POPE, S. B. Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. *New Journal of Physics* 6 (2004), 35. 237
- [180] PORTA, M. *Développement, vérification et validation des outils LES pour l'étude du bruit de combustion et de l'interaction combustion/acoustique/turbulence*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. 121, 139, 142, 196
- [181] PRIÈRE, C., GICQUEL, L., KAUFMANN, A., KREBS, W., AND POINSOT, T. LES of mixing enhancement : LES predictions of mixing enhancement for jets in cross-flows. *J. Turb.* 5 (2004), 1–30. 86

- [182] PROSSER, R. Improved Boundary conditions for the direct numerical simulation of turbulent subsonic flows I : Inviscid flows. *J. Comput. Phys.* *submitted* (2004). 140, 141
- [183] QUARTAPELLE, L., AND SELMIN, V. High-order Taylor-Galerkin methods for non-linear multi-dimensional problems., 1993. 117, 335
- [184] QUARTERONI, A., SACCO, R., AND SALERI, F. *Méthodes numériques - Algorithmes, analyse et applications*. Springer Verlag, 2007. 128, 210
- [185] QUARTERONI, A., AND VALLI, A. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. Springer Verlag, Heidelberg, 1994. 103, 108, 115, 149
- [186] R. FOX AND F. LAURENT AND M. MASSOT. Numerical simulation of spray coalescence in an eulerian framework : direct quadrature method of moments and multi-fluid method. *submitted to J. Comput. Phys.* (2007). 45
- [187] RADESPIEL, R. A Cell-Vertex Multigrid Method for the Navier-Stokes Equations. Tech. Rep. NASA Technical Memorandum 101557, NASA, 1989. 94
- [188] RÉVEILLON, J., MASSOT, M., AND PERA, C. Analysis and modeling of the dispersion of vaporizing polydispersed sprays in turbulent flows. In *Proceedings of the Summer Program 2002 - Center for Turbulence Research* (2002). 43
- [189] RÉVEILLON, J., AND VERVISCH, L. Spray vaporization in nonpremixed turbulent combustion modeling : a single droplet model. *Combust. Flame*, 121 (2000), 75–90. 44
- [190] RÉVEILLON, J., AND VERVISCH, L. Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion regimes. *J. Fluid Mech.* 537 (2005), 317–347. 21, 22, 261
- [191] REY, C. *Interactions collectives dans les instabilités de combustion à haute fréquence*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2004. 18
- [192] RIBER, E. *Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. 31, 35, 37, 39, 43, 68, 121, 135, 188, 213, 246
- [193] RIBER, E., GARCIA., M., MOUREAU, V., PITSCH, H., SIMONIN, O., AND POINSOT, T. Evaluation of numerical strategies for LES of two-phase reacting flows. In *Proc of the Summer Program* (2006), Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., pp. 197–213. 69
- [194] RICCHIUTO, M., CSÍK, A., AND DECONINCK, H. Residual distribution for general time-dependent conservation laws. *J. Comput. Phys.* 209 (2005), 249–289. 122
- [195] RIZZI, A., AND INOUE, M. Time-Split Finite-Volume Method for Three-Dimensional Blunt-Body Flow. *AIAA Journal* 11, 11 (1973), 1478–1485. 92
- [196] ROE, P. Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. *J. Comput. Phys.* 43 (1981), 357–372. 86, 93, 114
- [197] ROE, P. Fluctuations and signals - A framework for numerical evolution problems. In *Numerical methods for fluid dynamics, Proc. Conf. Reading/U.K* (1982), pp. 219–257. 104
- [198] ROE, P. Error Estimates for Cell-Vertex Solutions of the Compressible Euler Equations. Tech. Rep. ICASE No.87-6, NASA Langley Research Center, 1987. 94
- [199] RUDGYARD, M. *Cell Vertex methods for compressible gas flows*. PhD thesis, Oxford University Computing Laboratory, 1990. 91, 93
- [200] RUDGYARD, M. *Cell Vertex methods for compressible gas flows*. PhD thesis, University of Oxford. UK., 1990. 92, 94, 97, 169

- [201] RUDGYARD, M. Cell vertex methods for steady inviscid flow. In *Lectures Series 1993-04*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1993. 94, 95, 100, 111
- [202] RUDGYARD, M. Multidimensional wave decompositions for the Euler equations. In *Lectures Series 1993-04*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1993. 94, 104, 112
- [203] RUDGYARD, M. Integrated Preprocessing Tools for Unstructured Parallel CFD Applications. Tech. Rep. TR/CFD/95/08, CERFACS, 1995. 91
- [204] RUDGYARD, M., SCHOENFELD, T., STRUIJS, R., AUDEMAR, G., AND LEYLAND, P. A Modular Approach for Computational Fluid Dynamics. Tech. Rep. TR/CFD/95/07, CERFACS, 1995. 91
- [205] SAFJAN, A., AND ODEN, J. High-order Taylor-Galerkin methods for linear hyperbolic systems. *J. Comput. Phys.* 120 (1994), 206–230. 117, 335
- [206] SAGAUT, P. *Introduction à la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide incompressible*, Mathématiques & applications ed. Springer-Verlag, 1998. 56, 61, 238
- [207] SANJOSÉ, M. Etude Numérique et Application de la Simulation aux Grandes Echelles pour les Ecoulements Diphasiques. Master's thesis, INP Toulouse, 2006. 215
- [208] SANKARAN, V., AND MENON, S. LES of spray combustion in swirling flows. *J. Turb.* 3, 011 (2002), 1–23. 32, 85
- [209] SCHILLER, L., AND NAUMAN, A. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung* 77 (1935), 318–320. 43
- [210] SCHLÜTER, J. *Large Eddy Simulations of Flow and Mixing in Jets and Swirl Flows : Application to a Gas Turbine*. PhD thesis, INP Toulouse, 2000. 121
- [211] SCHMITT, P. *Simulation aux grandes échelles de la combustion étagée dans les turbines à gaz et son interaction stabilité-polluants-thermique*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 143, 144
- [212] SCHMITT, P., POINSOT, T., SCHUERMANS, B., AND GEIGLE, K. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner. *J. Fluid Mech.* 570 (2007), 17–46. 17, 143
- [213] SCHÖNFELD, T. *Méthodes de raffinement adaptatif de maillage pour le calcul des écoulements non-visqueux tridimensionnels*. PhD thesis, INP Toulouse, 1993. 92
- [214] SCHÖNFELD, T., AND POINSOT, T. Initial and boundary conditions for Large Eddy Simulation of combustion instabilities. In *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1999, pp. 73–84. 85, 131
- [215] SCHÖNFELD, T., AND RUDGYARD, M. Steady and Unsteady Flows Simulations Using the Hybrid Flow Solver AVBP. *AIAA Journal* 37, 11 (1999), 1378–1385. 91
- [216] SELLE, L. *Simulation aux grandes échelles des interactions flamme-acoustique dans un écoulement vrillé*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004. 18, 121, 213, 214, 236, 237, 241
- [217] SELLE, L., BENOIT, L., POINSOT, T., NICOUD, F., AND KREBS, W. Joint use of Compressible Large-Eddy Simulation and Helmholtz solvers for the analysis of rotating modes in an industrial swirled burner. *Combust. Flame* 145, 1-2 (2006), 194–205. 18, 188
- [218] SELLE, L., LARTIGUE, G., POINSOT, T., KOCH, R., SCHILDMACHER, K.-U., KREBS, W., PRADE, B., KAUFMANN, P., AND VEYNANTE, D. Compressible Large-Eddy Simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame* 137, 4 (2004), 489–505. 86, 188
- [219] SELMIN, V. Third-order finite element schemes for the solution of hyperbolic problems. Tech. Rep. 707, INRIA report, 1987. 115, 116, 117, 335

- [220] SENGISSEN, A. *Simulation aux grandes échelles des instabilités de combustion : vers le couplage fluide/structure*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. 86, 219
- [221] SENGUPTA, T. *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. Universities Press, Hyderabad (India), 2004. 82, 111, 115, 145, 147, 151, 153, 154, 156, 157, 163, 167
- [222] SENSIAU, C. Calculs thermoacoustiques dans les chambres de combustion. Tech. rep., ENSICA, 2005. 276
- [223] SHU, C. High Order Finite Difference and Finite Volume WENO Schemes and Discontinuous Galerkin Methods for CFD. Tech. Rep. ICASE No.2001-11, NASA Langley Research Center, 2001. 86
- [224] SIDILKOVER, D., AND ROE, P. Unification of Some Advection Schemes in Two Dimensions. Tech. Rep. ICASE No.95-10, NASA, 1995. 108
- [225] SIMONIN, O. Combustion and turbulence in two phase flows. Lecture Series 1996-02, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996. 34, 39
- [226] SIMONIN, O. Gas Particules. Cours d'options, Ecole Nationale Supérieure d'Electrotechnique, d'Electronique, d'Informatique, d'Hydraulique et des Télécommunications., 2002. 38, 39
- [227] SIMONIN, O., FEVRIER, P., AND LAVIEVILLE, J. On the spatial distribution of heavy particle velocities in turbulent flow : from continuous field to particulate chaos. *J. Turb.* 3 (2002). 32
- [228] SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations : 1. The basic experiment. *Monthly Weath. Rev.* 91 (1963), 99–164. 61
- [229] SPALDING, D. B. The combustion of liquid fuels. In *4th Symp. (Int.) on Combustion* (1953), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 847–864. 41
- [230] SPEZIALE, C., ERLEBACHER, G., ZANG, T., AND HUSSAINI, M. The subgrid-scale modeling of compressible turbulence. *Phys. Fluids* 31, 4 (1988), 940–942. 62
- [231] SQUIRES, K., AND EATON, J. Particle response and turbulence modification in isotropic turbulence. *Phys. Fluids* 2, 7 (1990), 1191–1203. 32
- [232] STEGER, J., AND WARMING, R. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods. *J. Comput. Phys.* 40 (1981), 263–293. 93
- [233] STEIN, E., DE BORST, R., AND HUGHES, T., Eds. *Encyclopedia of Computational Mechanics*, vol. 3. John Wiley & Sons, 2004. 84, 87
- [234] STRINGER, S., AND MORTON, K. Artificial viscosity for the cell vertex method. Tech. rep., Oxford University Computing Laboratory, 1996. 130, 131, 133, 136
- [235] STRUIJS, R. *A multi-dimensional upwind discretization method for the Euler equations on unstructured grids*. PhD thesis, Technical University of Delft, 1994. 24, 100, 105, 106, 107, 110, 114, 142
- [236] STULL, D., AND PROPHET, H. JANAF thermochemical tables, 2nd Edition. Tech. Rep. NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971. 49
- [237] SÜLI, E. Finite volume methods on distorted meshes : stability, accuracy, adaptativity. Tech. Rep. NA89/6, Oxford University Computing Laboratory, 1989. 94
- [238] SUTHERLAND, J. C., AND KENNEDY, C. A. Improved boundary conditions for viscous, reacting, compressible flows. *Journal of Computational Physics* 191 (2003), 502–524. 140, 141, 143
- [239] SWANSON, R., AND RADESPIEL, R. Cell Centered and Cell Vertex Multigrid Schemes for the Navier-Stokes. *AIAA Journal* 29 (1991), 697–703. 92, 93, 94

- [240] SYRED, N. A review of oscillation mechanisms and the role of the precessing vortex core (PVC) in swirl combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science* 32 (2006), 93–161. 222
- [241] TAM, C., AND WEBB, J. Dispersion-Relation-Preserving Finite Difference Schemes for Computational Acoustics. *J. Comput. Phys.* 107 (1993), 262–281. 167
- [242] TANGUY, S. *Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques*. PhD thesis, Faculté des sciences de l'Université de Rouen, 2004. 243
- [243] THOMPSON, K. Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems, II. *J. Comput. Phys.* 89 (1990), 439–461. 140, 209
- [244] THOMPSON, K. W. Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems. *J. Comput. Phys.* 68 (1987), 1–24. 140, 143
- [245] THUAL, O. Ondes dans les fluides - Article Pédagogiques Multimedia. 155
- [246] TOMAICH, T. *A Genuinely Multi-Dimensional Upwinding Algorithm for the Navier-Stokes Equations on Unstructured Grids using a Compact, Highly-Parallelizable Spatial Discretization*. PhD thesis, University of Michigan, 1995. 124
- [247] TSIEN, H. The transfer functions of rocket nozzles. *J. American Rocket Society*, May-June (1952), 139–143. 276
- [248] TURKEL, E. Review of Preconditioning Methods for Fluid Dynamics. *Applied Numerical Mathematics* 12, 257-284 (1993). 85
- [249] VAN DER WEIDE, E. *Compressible Flow Simulation on Unstructured Grids using Multi-dimensional Upwind Schemes*. PhD thesis, Technical University of Delft, 1998. 105, 106, 107, 110
- [250] VASILYEV, O. V., LUND, T., AND MOIN, P. A general class of commutative filters for LES in complex geometries. *J. Comput. Phys.* 146 (1998), 82–104. 60, 87
- [251] VERMOREL, O., BEDAT, B., SIMONIN, O., AND POINSOT, T. Numerical study and modelling of turbulence modulation in a particle laden slab flow. *J. Turb.* 4, 025 (2003). 32
- [252] VERVISCH, L., AND POINSOT, T. Direct Numerical Simulation of non premixed turbulent flames. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 30 (1998), 655–692. 82
- [253] VEYNANTE, D., AND POINSOT, T. Effects of pressure gradients on turbulent premixed flames. *J. Fluid Mech.* 353 (1997), 83–114. 54
- [254] VICHNEVETSKY, R., AND BOWLES, J. B. *Fourier analysis of numerical approximations of hyperbolic equations*. SIAM Studies in Applied Mechanics, Philadelphia, 1982. 7, 84, 101, 145, 147, 150, 151, 153, 157, 163, 167, 169
- [255] VIOZAT, C., HELD, C., MER, K., AND A.DERVIEUX. On Vertex-Centred Unstructured Finite Volume Methods for Stretched Anisotropic Triangularisations. Tech. Rep. 3464, INRIA, 1998. 93
- [256] VON NEUMANN, J., AND RICHTMEYER, R. D. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *J. Appl. Phys.* 21 (1950), 231. 131, 136
- [257] WALL, C., PIERCE, C. D., AND MOIN, P. A semi-implicit method for resolution of acoustic waves in low Mach number flows. *J. Comput. Phys.* 181 (2002), 545–563. 84, 85
- [258] WARMING, R., AND HYETT, B. The modified equation approach to the stability and accuracy of finite difference methods. *J. Comput. Phys.* 14 (1974), 159–179. 155
- [259] WHITE, F. *Viscous fluid flow*. McGraw-Hill, New-York, 1991. 52
- [260] WILLIAMS, F. *Combustion theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985. 54

- [261] YOO, C. S., AND IM, H. G. Characteristic Boundary Conditions for Simulations of Compressible Reacting Flows with Multi-Dimensional, Viscous, and Reaction Effects. *Combust. Theory and Modelling in press* (2007). 143, 196
- [262] YOSHIZAWA, A. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *Phys. Fluids* 29, 7 (1986), 2152–2164. 62
- [263] ZALESAK, S. T. Fully multidimensional flux-corrected transport. *J. Comput. Phys.* 31 (1979), 335–362. 122
- [264] ZIENKIEWICZ, O., AND MORGAN, K. *Finite Elements and Approximation*. John Wiley & Sons, 1983. 108

BIBLIOGRAPHIE

Annexes

Annexe A

Inversion de la matrice de masse

On présente ici la méthode utilisée pour inverser la matrice de masse dans AVBP. Cette étape est exactement la même à chaque étape des schémas TTG ou du schéma Galerkin couplé à une intégration temporelle RK3. Pour simplifier l'étude présente, on considère une seule étape, on passe de la n -ième itération temporelle à $(n + 1)$ -ième. On se place en outre dans le cas de la convection d'un scalaire ($m = 1$) pour simplifier les écritures. La généralisation à un système est évidente. Après le calcul de la partie spatiale, on peut écrire à partir des équations (4.90)-(4.91) :

$$[\mathcal{M}]\{\delta U^n\} = -\{\Phi\} \quad (\text{A.1})$$

où $[\mathcal{M}] \in \mathcal{M}_{N_h}(\mathbb{R})$ est la matrice de masse, $\{\delta U^n\} = \{U^{n+1}\} - \{U^n\}$ et $-\{\Phi\}$ correspond au membre de droite (termes spatiaux) des équations (4.90)-(4.91). On a, pour la ligne j : $\Phi_j = N_j V_j$, où N_j est le résidu au noeud j défini pour la méthode *cell-vertex*. On applique alors la méthode de Jacobi pour inverser la matrice de masse car celle-ci est définie positive à diagonale dominante. On peut ainsi déterminer $\{\delta U^n\}$. On pose tout d'abord :

$$\{\delta U^{(0)}\} = -[\mathcal{V}]^{-1}\{\Phi\} \quad (\text{A.2})$$

où $[\mathcal{V}] = \text{diag}(V_j)$ est la matrice diagonale obtenue après condensation de $[\mathcal{M}]$ soit :

$$\mathcal{V}_{jj} = \sum_{k=1}^{N_h} \mathcal{M}_{jk}$$

La p -ième étape de l'inversion de $[\mathcal{M}]$ est donnée par [62, 47]¹ :

$$\{\delta U^{(p)}\} = \{\delta U^{(0)}\} - [\mathcal{V}]^{-1}([\mathcal{M}] - [\mathcal{V}])\{\delta U^{(p-1)}\} \quad (\text{A.3})$$

¹On n'applique pas strictement la méthode de Jacobi. En effet, en lieu et place de $\mathcal{V}$, on devrait utiliser la matrice composée uniquement de la diagonale de $[\mathcal{M}]$.

Dans AVBP, les matrices n'étant pas construites explicitement, on utilise donc la formule locale :

$$\delta U_j^{(p)} = \frac{1}{V_j} \left[-\Phi_j - \sum_{k \neq j} \mathcal{M}_{jk} \delta U_k^{(p-1)} + \mathcal{M}_{jj} \delta U_j^{(p-1)} \right] \quad (\text{A.4})$$

Soit :

$$\delta U_j^{(p)} = -N_j - \frac{1}{V_j} \left[\sum_{e \in \mathcal{D}_j} \left(\sum_{k \in K_e; k \neq j} \mathcal{M}_{jk}^e \delta U_k^{(p-1)} - \mathcal{M}_{jj} \delta U_j^{(p-1)} \right) \right] \quad (\text{A.5})$$

Annexe B

Optimisation des coefficients de schémas numériques d'ordre élevé pour la Simulation aux Grandes Echelles par algorithme génétique

B.1 Introduction

Cette annexe présente le travail conjoint de Florent Duchaine [64] et de l'auteur de ce manuscrit. Il s'agit d'un exercice mettant en commun des notions d'optimisation et d'analyse numérique.

Colin et Rudgyard [47] ont présenté une famille de schémas numériques d'ordre élevé pour réaliser des Simulations aux Grandes Échelles dans des géométries complexes. La construction de ces schémas de convection fait intervenir des combinaisons linéaires des valeurs du vecteur solution dont les coefficients déterminent à la fois la précision et le temps de calcul. En appliquant certaines règles et compromis, ils proposent des jeux de paramètres permettant de retrouver des schémas classiques de la littérature comme *TTG3* ou *TTG4A* et en introduisent un nouveau : *TTGC*.

Notre but est de mettre en œuvre une méthodologie systématique qui nous permettra de vérifier que ces schémas sont optimaux vis à vis des règles et compromis que leurs auteurs se sont fixés. Nous souhaitons également utiliser cette stratégie pour explorer de manière flexible les possibilités de proposer de nouveaux schémas en modifiant les objectifs et les contraintes.

La systématisation des tâches par le biais d'algorithmes d'optimisation est une approche intéressante qui permet d'améliorer des solutions connues et d'explorer de nouveaux jeux de paramètres. Le principal effort réside alors dans la définition des problèmes d'optimisation à partir du but recherché et des contraintes qui en découlent. Souvent rédhibitoire, cette étape contrôle le processus de recherche des solutions optimales ainsi que la qualité des optimums.

B.2 L'optimisation par algorithmes génétiques

Il existe un grand nombre de méthodes qui permettent d'obtenir les optimums de problèmes. Ces méthodes, aussi diverses qu'elles soient, sont le plus souvent nées pour répondre à une problématique précise. De fait, il n'existe pas de méthode d'optimisation qui soit performante pour toutes les applications. Néanmoins, l'optimisation moderne a vu apparaître une nouvelle classe de méthodologies, généralement nommées évolutionnaires, qui sont très robustes et dont la convergence peut être montrée par des considérations statistiques [126]. Leur principale faiblesse est leur relative lenteur de la convergence qui nécessite un grand nombre d'évaluations des fonctions objectifs.

Bien souvent, lorsque l'on est confronté à un problème d'optimisation, il apparaît plusieurs objectifs dont on souhaite connaître les optimums. On parle alors d'optimisation multi-objectif. Le problème se complique ardemment si ces objectifs n'ont pas d'optimum en commun dans l'espace des paramètres d'optimisation. Il n'y a pas alors un point optimum mais un ensemble de points que l'on appelle front de Pareto [168]. La construction d'un front de Pareto sous-entend la définition de la notion de dominance : un point de l'espace des paramètres d'optimisation domine un autre s'il a toutes les valeurs de ses fonctions objectifs meilleures que ce deuxième point. Les points non dominés forment le front de Pareto, traduction de l'équilibre entre les différentes fonctions objectifs. De nombreuses études sur l'optimisation multi-critère ont montré la qualité des algorithmes évolutionnaires pour déterminer efficacement des fronts de Pareto [43].

Les algorithmes génétiques font partie des algorithmes évolutionnaires. Leur principe de fonctionnement est calqué sur l'évolution d'une population naturelle soumise à son environnement : d'une génération à l'autre, les individus les plus adaptés au milieu (ceux qui ont des meilleures performances en terme de fonctions objectifs et de non dominance) verront statistiquement leur potentiel génétique (paramètres d'optimisation) conservé. Les principaux opérateurs de ces algorithmes sont :

- *les croisements* : ils permettent d'évoluer vers des individus mieux adaptés au milieu à partir d'individus performants (notion d'exploitation des données disponibles afin d'accélérer la convergence),
- *les mutations* : elles donnent de nouvelles pistes vers des types d'individus inexistantes et potentiellement performants (notion d'exploration de l'espace des paramètres d'optimisation afin de trouver les optimums globaux),
- *l'élitisme* : il permet de conserver les individus les mieux adaptés à l'environnement.

Pour cette étude, nous utilisons le code *NSGA-II* (*Non Dominated Shorting Genetic Algorithm version 2* [58]). Comme l'indique son acronyme, *NSGA-II* est un code basé sur un algorithme génétique multi-objectif dans lequel la recherche du front de Pareto se fait par une méthode de détection de non dominance optimisée. Il permet en outre de trouver des fronts de Pareto pour des problèmes ayant des contraintes d'inégalité et d'égalité de tous types.

B.3 Schémas Taylor-Galerkin pour une équation de convection linéaire mono-dimensionnelle et à coefficients constants

Nous fournissons ici une brève description des schémas numériques qui servent de base à ce travail et qu'ont décrits Colin et Rudyard en détails [47].

B.3.1 Détermination de la famille de schémas

L'analyse que nous entreprenons est basée sur l'équation de convection monodimensionnelle, linéaire et à coefficient constant :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (\text{B.1})$$

où $u = u(x, t)$ est un champ scalaire et c est une constante non nulle. Les schémas Taylor-Galerkin ont été introduits par Donea [62] en partant de deux constats :

- les schémas de convection, centrés en espace, obtenus en utilisant la méthode des éléments finis de Galerkin présentent une erreur de dispersion beaucoup plus faible que leurs homologues construits avec la méthode des différences finies, grâce à l'ajout de la matrice de masse,
- associé à une méthode des lignes comme les schémas de Runge-Kutta ou d'Adams, le domaine de stabilité des éléments finis de Galerkin est réduit par rapport aux différences centrées classiques (à cause de la matrice de masse). Par ailleurs, ces schémas sont très sujets aux oscillations noeud à noeud (*wiggles*).

Pour pallier à ces problèmes, Donea est parti des idées de Lax et Wendroff [119]. Le terme $\partial_t u$ de l'équation (B.1) est écrit sous forme d'une série de Taylor en temps à l'ordre 4 puis les dérivées temporelles sont remplacées par des dérivées spatiales en utilisant l'équation (B.1). Celles-ci sont ensuite discrétisées via la méthode des éléments finis de Galerkin et le schéma obtenu, nommé Euler-Taylor-Galerkin ou parfois Lax-Wendroff-Taylor-Galerkin [63], est précis à l'ordre 3 en espace et en temps. Ce schéma est très peu dispersif, ne souffre pas ou peu d'oscillations hautes-fréquences et a un domaine de stabilité accru par rapport à un schéma Lax-Wendroff éléments finis.

L'inconvénient majeur de ce schéma reste le traitement des systèmes d'équations de convection non-linéaires et multi-dimensionnelles comme l'évoque Selmin [219] (le domaine de stabilité se réduit quand le nombre de dimensions augmente). Pour remédier à ce problème, Selmin réécrit la série de Taylor en temps de départ en 2 étapes (une de prédiction, l'autre de correction) et créé le premier schéma *two step* Taylor Galerkin (TTG). D'autres schémas sont par la suite présentés dans la littérature (TTG4A, TTG4B) [183] et des schémas multi-étapes, inconditionnellement stables, sont introduits [205]. Nous ne nous intéressons toutefois qu'aux schémas 2 étapes, pour des raisons de coût de calcul et de faisabilité dans le code AVBP¹. Colin et Rudgyard [47] ont généralisé la formulation des schémas TTG et ont réécrit ceux-ci en une famille de schémas définis par six paramètres $(\alpha, \beta, \theta_1, \theta_2, \epsilon_1, \epsilon_2)$:

$$\begin{aligned} \tilde{u}^n &= u^n + \alpha \Delta t \partial_t u^n + \beta \Delta t^2 \partial_{tt} u^n \\ u^{n+1} &= u^n + \Delta t \partial_t (\theta_1 u^n + \theta_2 \tilde{u}^n) + \Delta t^2 \partial_{tt} (\epsilon_1 u^n + \epsilon_2 \tilde{u}^n) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Après discrétisation de ces équations en utilisant des éléments linéaires et un schéma de Galerkin, une analyse spectrale donne le coefficient d'amplification $G(\xi)$:

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\xi) &= 1 + \frac{1}{M} (-\alpha \nu \hat{\Delta}_0 + \beta \nu^2 \hat{\delta}^2) \\ G(\xi) &= 1 + \frac{1}{M} [-(\theta_1 + \theta_2 \tilde{G}) \nu \hat{\Delta}_0 + (\epsilon_1 + \epsilon_2 \tilde{G}) \nu^2 \hat{\delta}^2] \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

avec $\hat{\Delta}_0$, $\hat{\delta}^2$, $\hat{M}$ respectivement les transformées de Fourier des opérateurs de différentiation spatiale

¹AVBP : Code de Simulation aux Grandes Échelles des écoulements turbulents réactifs développé par le CERFACS

centré du premier et second ordre et de la matrice de masse données par :

$$\hat{\Delta}_0(\xi) = i \sin(\xi) \quad (\text{B.4})$$

$$\hat{\delta}^2(\xi) = -4 \sin^2\left(\frac{\xi}{2}\right) \quad (\text{B.5})$$

$$\hat{M}(\xi) = 1 - \frac{2}{3} \sin^2\left(\frac{\xi}{2}\right) \quad (\text{B.6})$$

avec $\xi = kh$ est le nombre d'onde adimensionné (k étant le nombre d'onde et h le pas d'espace) et $\nu = c\Delta t/\Delta x$ le nombre de Courant-Friedrichs-Lewy. Le module $|G(\xi)|$ et la phase $\arg G(\xi)$ du facteur d'amplification permettent respectivement de déterminer l'amplification ou l'amortissement et le déplacement d'une onde monochromatique de nombre d'onde adimensionné ξ en un pas de temps Δt . Une amplification différente de 1 introduit une erreur d'amplitude (erreur de diffusion ou dissipation) dans la solution discrète. Une différence de phase $\arg[G(\xi)] - \nu\xi/\pi$ traduit une erreur de phase (erreur de dispersion)².

Le développement de Taylor du facteur d'amplification $G(\xi)$ à un certain ordre impose des contraintes sur les paramètres du schéma. Ainsi, nous obtenons :

- Contrainte de premier ordre en temps : $\theta_1 + \theta_2 = 1$,
- Contrainte de second ordre en temps : $\epsilon_1 + \epsilon_2 + \alpha\theta_2 = 1/2$,
- Contrainte de troisième ordre en temps : $\beta\theta_2 + \alpha\epsilon_2 = 1/6$,
- Contrainte de quatrième ordre en temps : $\beta\epsilon_2 = 1/24$.

Lorsque les trois premières contraintes sont respectées, le schéma est également précis au troisième ordre en espace (les expressions des contraintes sont différentes de celles fournies par Colin et Rudgyard [47] mais sont équivalentes).

B.3.2 Les schémas TTGC et TTG4A

La classe des schémas TTGC(γ), d'ordre 3 en espace et en temps, est définie par le jeu de paramètres suivant :

$$\theta_1 = 0; \quad \theta_2 = 1; \quad \epsilon_1 = \gamma; \quad \epsilon_2 = 0; \quad \alpha = 1/2 - \gamma; \quad \beta = 1/6 \quad (\text{B.7})$$

avec $\gamma \in [0, 1/2]$.

Le schéma TTG4A, d'ordre 4 en temps, est défini par :

$$\theta_1 = 1; \quad \theta_2 = 0; \quad \epsilon_1 = 0; \quad \epsilon_2 = 1/2; \quad \alpha = 1/3; \quad \beta = 1/12 \quad (\text{B.8})$$

La figure B.8 fournit un exemple de la variation du module du coefficient d'amplification (dissipation) et de la vitesse de phase modifiée adimensionnée (dispersion) des schémas TTG4A et TTGC(γ)

²En général, l'erreur de dispersion est exprimée comme une erreur de vitesse de phase donnée par : $\frac{c_R^*}{c} = -\frac{\arg[G(\xi)]}{\nu\xi}$ ou sous forme d'un nombre d'onde modifié : $\frac{k_R^*}{k} = -\frac{\arg[G(\xi)]}{\nu h}$ et c_R^* et k_R^* sont la vitesse et le nombre d'onde modifiés (parties réelles).

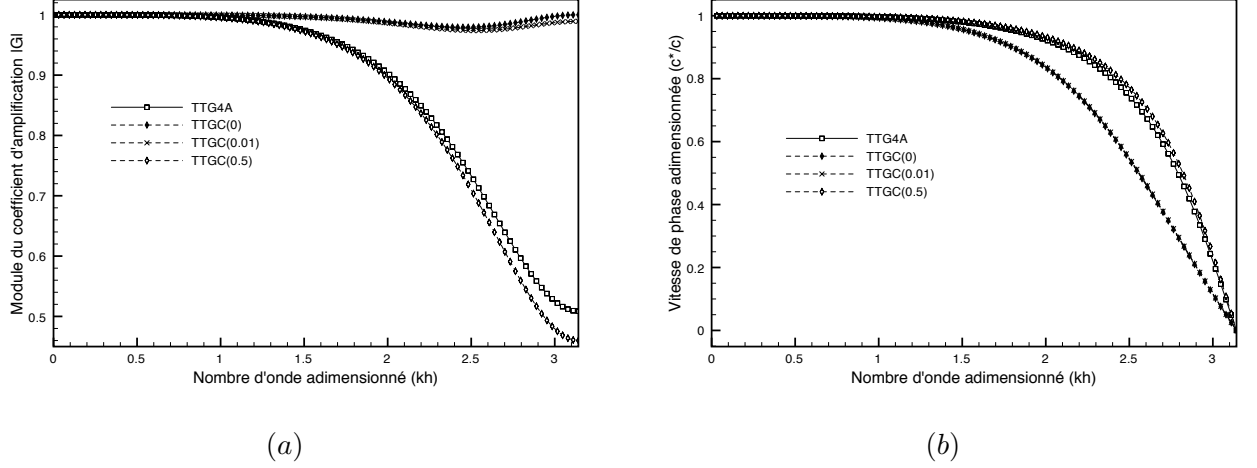


FIG. B.1 - (a) Module $|G|$ et (b) vitesse de phase $\frac{c^*}{c}$ modifiée des schémas TTG4A et TTGC(γ) pour $\gamma = \{0, 0.01, 0.5\}$. Le CFL est de 0.3.

en fonction du nombre d'onde adimensionné et pour un CFL de 0.3. En terme de dissipation, il apparaît clairement que les schémas TTGC($\gamma = 0$) et TTGC($\gamma = 0.5$) encadrent les autres schémas. Le premier est le moins dissipatif de tous. Le second, au contraire, a le taux d'amortissement le plus fort. En ce qui concerne la dispersion, les conclusions sont à l'opposée. Le schéma le moins dispersif est TTGC($\gamma = 0.5$). TTGC($\gamma = 0$) a les moins bonnes performances en ce qui concerne la phase.

Globalement, la figure B.8 montre que les schémas TTG présentés ici sont très précis. Leur comportement pour des longueurs d'onde supérieures à $4h$ est excellent.

B.3.3 Mise en place du problème d'optimisation sur des schémas d'ordre 3 en espace

Nous allons utiliser l'algorithme d'optimisation NSGA-II pour identifier les valeurs optimales des paramètres $(\alpha, \beta, \theta_1, \theta_2, \epsilon_1, \epsilon_2)$ dans diverses conditions et toujours de manière à :

- maximiser la plage de fréquences ξ pour laquelle la dissipation est comprise entre $[Dissip_m, 1]$, avec $Dissip_m$ une dissipation minimale désignée comme critique,
- maximiser la plage de fréquences ξ pour laquelle la dispersion est comprise entre $[Disper_m, 1]$, avec $Disper_m$ une dispersion minimale désignée comme critique.

Pour cela, les fonctions objectifs à minimiser sont de la forme :

- $(\pi - \xi_m)_{dissip}$, où ξ_m est la fréquence au delà de laquelle la dissipation est inférieure à la dissipation critique $Dissip_m$ (figure B.2-a),
- $(\pi - \xi_m)_{disper}$, où ξ_m est la fréquence au delà de laquelle la dispersion est inférieure à la dispersion critique $Disper_m$ (figure B.2-b).

Ce problème à deux objectifs et six paramètres est soumis à un ensemble de contraintes qui traduisent l'ordre 3 en espace des schémas. Le jeu de six paramètres $(\theta_1, \theta_2, \epsilon_1, \epsilon_2, \alpha, \beta)$ est contraint par les trois

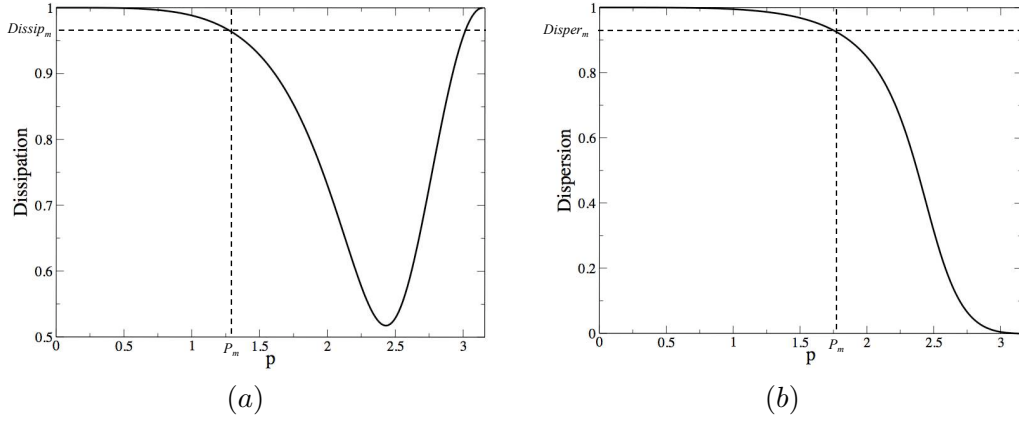


FIG. B.2 - Détermination des fréquences p_m correspondant à $Dissip_m$ (a) et $Disper_m$ (b)

relations :

$$\begin{cases} \theta_1 + \theta_2 = 1 \\ \epsilon_1 + \epsilon_2 + \alpha\theta_2 = 1/2 \\ \beta\theta_2 + \alpha\epsilon_2 = 1/6 \end{cases} \quad (B.9)$$

Deux stratégies d'optimisation sont alors possibles : partir sur une optimisation avec six paramètres et trois contraintes ou alors ne garder que trois paramètres libres comme variables d'optimisation et déduire les autres paramètres de ces trois variables. Le premier choix n'est pas évident dans notre cas puisqu'il s'agit de contraintes d'égalité qui sont, par nature, difficiles à satisfaire. Nous avons donc opté pour la deuxième possibilité en choisissant comme variables d'optimisation $(\theta_1, \epsilon_1, \alpha)$ et en exprimant les trois autres paramètres par les équations B.9 :

$$\begin{cases} \theta_2 = 1 - \theta_1 \\ \epsilon_2 = 1/2 - \epsilon_1 - \alpha\theta_2 \\ \beta = (1/6 - \alpha\epsilon_2)/\theta_2 \end{cases} \quad (B.10)$$

Afin de conserver les valeurs des six paramètres $(\theta_1, \theta_2, \epsilon_1, \epsilon_2, \alpha, \beta)$ comprises entre 0 et 1, il est impératif de délimiter l'espace de recherche par des contraintes de bord sur les variables $(\theta_1, \epsilon_1, \alpha) \in [0, 1]^3$ ainsi que des contraintes d'inégalité pour assurer $(\epsilon_2, \beta) \in [0, 1]^2$. Certains jeux de paramètres peuvent mener à des schémas instables. Ces schémas se caractérisent par une dissipation supérieure à 1 sur une gamme de fréquence. Nous avons décidé d'inclure une dernière contrainte qui éliminera les schémas qui présentent ces comportements.

Finalement, le problème d'optimisation généralisé peut se mettre sous la forme :

$$\min \begin{cases} (\pi - \xi_m)_{dissip} \\ (\pi - \xi_m)_{disper} \\ \xi \in [0; \pi] \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \theta_1 \in [0; 1] \\ \epsilon_1 \in [0; 1] \\ \alpha \in [0; 1] \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} |\epsilon_2| \leq 1 \\ |\beta| \leq 1 \\ \text{Max}(Dissip) \leq 1 \end{cases} \quad (B.11)$$

Confronté à ce problème d'optimisation somme toute complexe, nous disposons d'une part du code *DRPs*³ qui calcule la dissipation et la dispersion des schémas numériques de la famille B.2 pour divers jeux de paramètres $(\theta_1, \theta_2, \epsilon_1, \epsilon_2, \alpha, \beta)$. D'autre part, le code *NSGA-II* est bien adapté à ce type d'exercice d'optimisation sous contraintes. De manière classique, le développement d'un outil pour répondre à ce type d'optimisation se fait en intégrant une version modifiée de *DRPs*, qui calcule les valeurs des fonctions objectifs et des contraintes, dans *NSGA-II*. Ce modèle de programmation est appelé hiérarchique et constitue un programme monolithique.

Pour simplifier l'intégration informatique de cet outil, nous avons choisi d'utiliser une approche par couplage. De cette manière, les codes restent totalement indépendants et échangent les données dont ils ont besoin : les paramètres d'optimisation (coefficients des schémas numériques), les fonctions objectifs (tailles des plages de fréquences caractéristiques pour la dissipation et la dispersion) et les contraintes (validations sur les coefficients et sur la stabilité du schéma). L'utilisation d'un coupleur nous dispense des problèmes de compatibilité entre les codes au niveau des noms de sous-programmes, des variables globales, ou encore des conflits d'accès aux fichiers en lecture et écriture. Cette stratégie est également beaucoup plus souple que le codage monolithique. Elle nous permettra de réaliser différentes études sans avoir à reconstruire intégralement l'outil.

B.4 Résultats numériques

B.4.1 Problème d'optimisation de base

La résolution du problème B.11 pour différents nombres de Courant (CFL) compris dans l'intervalle $[0.1; 0.7]$ mène à plusieurs fronts de Pareto (figures B.3-a). Ces fronts mettent en évidence le conflit entre les qualités de dissipation et de dispersion des schémas numériques de la famille B.2. Pour des CFL allant de 0.1 à 0.3, il est possible d'améliorer considérablement la dissipation sans trop dégrader la dispersion. Au delà d'un CFL de 0.4, c'est l'effet inverse qui se produit : les gains en dispersion n'entraînent que de faibles dégradation des propriétés de dissipation.

Quelque soit le CFL dans le domaine étudié, le schéma $\text{TTGC}(\gamma = 0)$ est quasiment optimal au sens de Pareto (figures B.3-b), privilégiant les qualités de dissipation au détriment des propriétés de dispersion. Le schéma $\text{TTGC}(\gamma = 0.5)$ est aussi optimal au sens de Pareto pour des CFL compris dans la gamme $[0.1; 0.4]$, donnant au contraire plus d'importance aux caractéristiques de dispersion.

B.4.2 Optimisation avec une contrainte sur la dissipation des hautes fréquences

L'analyse du facteur d'amplification des schémas TTG (figures B.1) montre que dans plusieurs cas de figure, les phénomènes hautes fréquences (lorsque ξ tend vers π) sont moins dissipés que les phénomènes discrétisés sur un plus grand nombre de nœuds. Le schéma $\text{TTGC}(\gamma = 0.5)$ présente un comportement extrême puisqu'à partir d'un CFL de l'ordre de 0.5, il devient instable lorsque certaines hautes fréquences apparaissent dans la solution numérique. Ceci confirme les observations de Colin et Rudgyard [47] concernant la réduction du domaine de stabilité quand γ augmente. La plupart du temps, les hautes fréquences ($2\Delta x$ ou $4\Delta x$) sont des artefacts numériques qui ne traduisent pas la physique simulée. Ces ondes numériques, appelées généralement *wiggles*, naissent sur des singularités des calculs

³DRPs = Dispersion Relation Preservation study

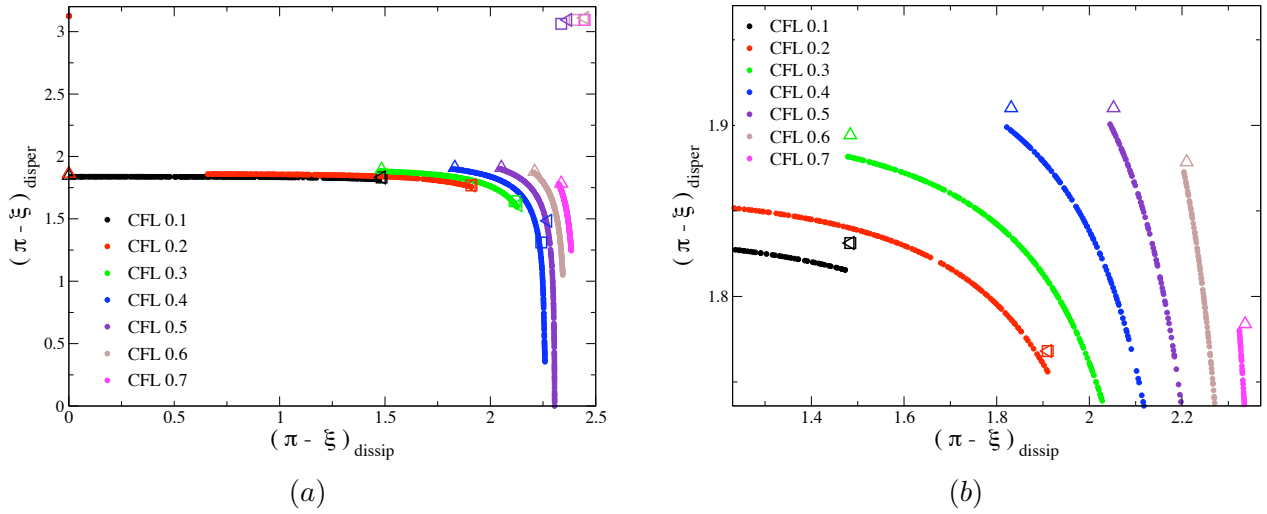


FIG. B.3 - Solutions non dominées du problème B.11 pour des CFL compris dans l'intervalle $[0.1; 0.7]$. Comparaison avec les schémas TTG de Colin et Rudgyard. (Carré : TTG4A, Triangle : TTGC(0), Triangle gauche : TTGC(0.5))

(conditions aux limites, discontinuités physiques) et peuvent polluer les solutions, voire faire diverger les simulations.

Conscients des problèmes causés par les wiggles dans les simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente dans les foyers aéronautiques, nous voulons évaluer les propriétés de dissipation et de dispersion des schémas TTG dissipant les hautes fréquences. Le problème d'optimisation sur lequel nous aboutissons est le problème B.11 auquel nous ajoutons une contrainte qui privilégie les schémas dont la dissipation est monotone sur l'intervalle $[0; \pi]$:

$$\min \begin{cases} (\pi - \xi_m)_{\text{dissip}} \\ (\pi - \xi_m)_{\text{disper}} \\ \xi \in [0; \pi] \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \theta_1 \in [0; 1] \\ \epsilon_1 \in [0; 1] \\ \alpha \in [0; 1] \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} |\epsilon_2| \leq 1 \\ |\beta| \leq 1 \\ \text{Max}(Dissip) \leq 1 \\ \frac{\partial(Dissip)}{\partial \xi} \leq 0 \quad \xi \in [0; \pi] \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

Les fronts de Pareto obtenus pour les différents CFL testés dans la plage $[0.1; 0.6]$ sont des restrictions des fronts de Pareto du problème B.11 (figure B.4). En effet, l'ajout de la contrainte sur la monotonie de la dissipation élimine du domaine des réalisables les schémas qui ont les meilleures performances en terme de dissipation. La contrainte agit de manière plus brutale lorsque le CFL vaut 0.7.

B.4.3 Exemple de sélection d'un schéma performant la SGE

Comme nous l'avons vu jusqu'ici, le choix d'un schéma se fait en étudiant le compromis entre ses qualités de dissipation et de dispersion pour différents CFL. L'exercice final consiste à intégrer le CFL dans le processus d'optimisation afin de fournir un ensemble de schémas optimaux au sens de Pareto

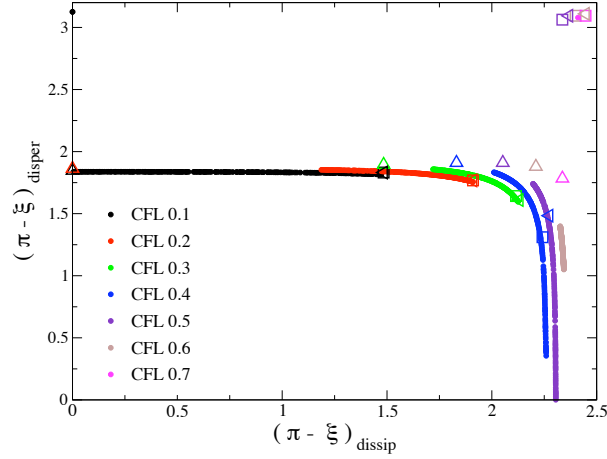


FIG. B.4 - Solutions non dominées du problème B.12 pour des CFL compris dans l'intervalle $[0.1; 0.7]$. Comparaison avec les schémas TTG de Colin et Rudgyard. (Carré : TTG4A, Triangle : TTGC(0), Triangle gauche : TTGC(0.5))

pour une gamme de CFL donnée. Le problème d'optimisation de base devient :

$$\min \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{nb_cfl} \sum_C (\pi - \xi_m^C)_{dissip} \\ \frac{1}{nb_cfl} \sum_C (\pi - \xi_m^C)_{disper} \\ \xi \in [0; \pi] \\ C \in [0.1; 0.7] \end{array} \right. \quad avec \quad \left\{ \begin{array}{l} \theta_1 \in [0; 1] \\ \epsilon_1 \in [0; 1] \\ \alpha \in [0; 1] \end{array} \right. \quad (B.13)$$

$$et \quad \left\{ \begin{array}{l} |\epsilon_2| \leq 1 \\ |\beta| \leq 1 \\ Max(Dissip^C) \leq 1 \\ \xi \in [0; \pi] \\ C \in [0.1; 0.7] \end{array} \right.$$

Et en considérant la contrainte sur la dissipation des hautes fréquences :

$$B.13 \quad avec \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(Dissip^C)}{\partial \xi} \leq 0 \\ \xi \in [0; \pi] \\ C \in [0.1; 0.7] \end{array} \right. \quad (B.14)$$

La figure B.5 présente les solutions non dominées des problèmes multi-objectifs B.13 et B.14. Nous retrouvons que le schéma TTGC($\gamma = 0$) est une solution optimale au sens de Pareto du problème B.13,

privilégiant uniquement la performance sur la dissipation. Le front de Pareto du problème B.14 est beaucoup plus restreint et apporte un ensemble de solutions dont les performances sont dégradées par rapport au problème B.13. Cette diminution de qualité est liée à l'effet mis en évidence sur la figure B.4 pour un CFL de 0.7.

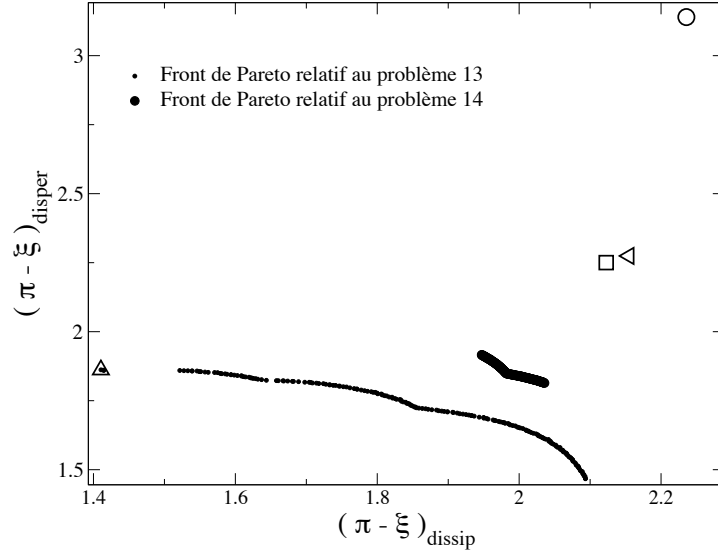


FIG. B.5 - Solutions non dominées des problèmes B.13 et B.14. Comparaison avec les schémas TTG de Colin et Rudgyard. (Carré : TTG4A, Triangle : TTGC(0), Triangle gauche : TTGC(0.5)) et Lax Wendroff (Cercle)

Pour la suite, notons $\text{TTG}(\text{Dissip})$ et $\text{TTG}(\text{Disper})$ les deux schémas extrêmes du front de Pareto correspondant au problème B.14, et qui sont respectivement le meilleur schéma en terme de dissipation et de dispersion. Les coefficients de ces schémas sont :

$$\text{TTG}(\text{Dissip}) \begin{cases} \theta_1 = 0.236 \\ \theta_2 = 1 - \theta_1 \\ \epsilon_1 = 0.173 \\ \epsilon_2 = \frac{1}{2} - \epsilon_1 - \alpha\theta_2 \\ \alpha = 0.426 \\ \beta = \left(\frac{1}{6} - \alpha\epsilon_2\right) \frac{1}{\theta_2} \end{cases} \quad \text{TTG}(\text{Disper}) \begin{cases} \theta_1 = 0.476 \\ \theta_2 = 1 - \theta_1 \\ \epsilon_1 = 0.217 \\ \epsilon_2 = \frac{1}{2} - \epsilon_1 - \alpha\theta_2 \\ \alpha = 0.355 \\ \beta = \left(\frac{1}{6} - \alpha\epsilon_2\right) \frac{1}{\theta_2} \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

Pour valider le comportement des schémas $\text{TTG}(\text{Dissip})$ et $\text{TTG}(\text{Disper})$ par rapport aux schémas de Colin et Rudgyard, nous avons mené un test de convection d'une onde gaussienne perturbée par des wiggles (figure B.6). La vitesse de convection c est prise égale à 1. Le domaine de calcul monodimensionnel s'étend de 0 à 1 et est discrétisé par 100 points uniformément répartis. Une condition de périodicité entre les bords du domaine permet à l'onde convectée de se retrouver, théoriquement, à sa position de départ à tous les temps entiers. Le CFL de la simulation est de 0.55 et le temps final de 120.

La figure B.7 présente les résultats obtenus à l'issus du temps final. La première remarque que nous pouvons formuler concerne la qualité des résultats après autant d'itérations. Un schéma d'ordre 2 classique aurait fortement dispersé les différentes composantes spectrales de la solution, ce qui n'est pas du tout le cas ici. Le maximum de la solution est exactement à l'abscisse où on s'attend à le trouver. La solution est en outre très peu dissipée : l'amplitude du maximum est proche de celle de la solution initiale non perturbée. Comme nous pouvons le constater, seul le schéma $\text{TTGC}(\gamma = 0)$ n'a pas dissipé les wiggles ajoutés à la solution initiale. Ce schéma n'est donc pas dissipatif au sens de Kreiss, ce qui

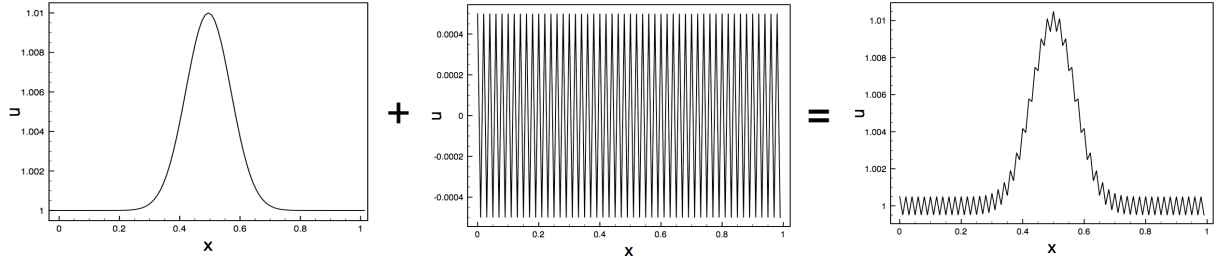


FIG. B.6 - Onde gaussienne perturbée par des wiggles

l'élimine définitivement pour la discrétisation d'une équation non-linéaire, du fait de l'aliasing. En revanche, il est globalement le schéma qui présente le résultat le moins dissipé (ce qui ne contre-balance pas la remarque précédente !). Tous les schémas présentent des minima de part et d'autre de la gaussienne indiquant qu'ils ne sont pas positifs. Ceci est typique d'une hyperdiffusion d'ordre 4 (diffusion d'ordre élevée), qui correspond au premier terme de l'erreur de troncature des schémas étudiés. Ce phénomène est plus marqué pour les schémas les plus dissipatifs, comme $\text{TTGC}(\gamma = 0.5)$, mais globalement peu sensible sur ce cas test. Soulignons que les deux schémas optimaux, $\text{TTG}(\text{Dissip})$ et $\text{TTG}(\text{Disper})$, en souffrent moins que TTG4A et $\text{TTGC}(\gamma = 0.5)$. En outre, mis à part $\text{TTGC}(\gamma = 0)$, que nous avons éliminé, $\text{TTG}(\text{Dissip})$ et $\text{TTG}(\text{Disper})$ sont les schémas les moins dissipatifs mais ont cependant totalement éliminé les wiggles comme nous le souhaitions.

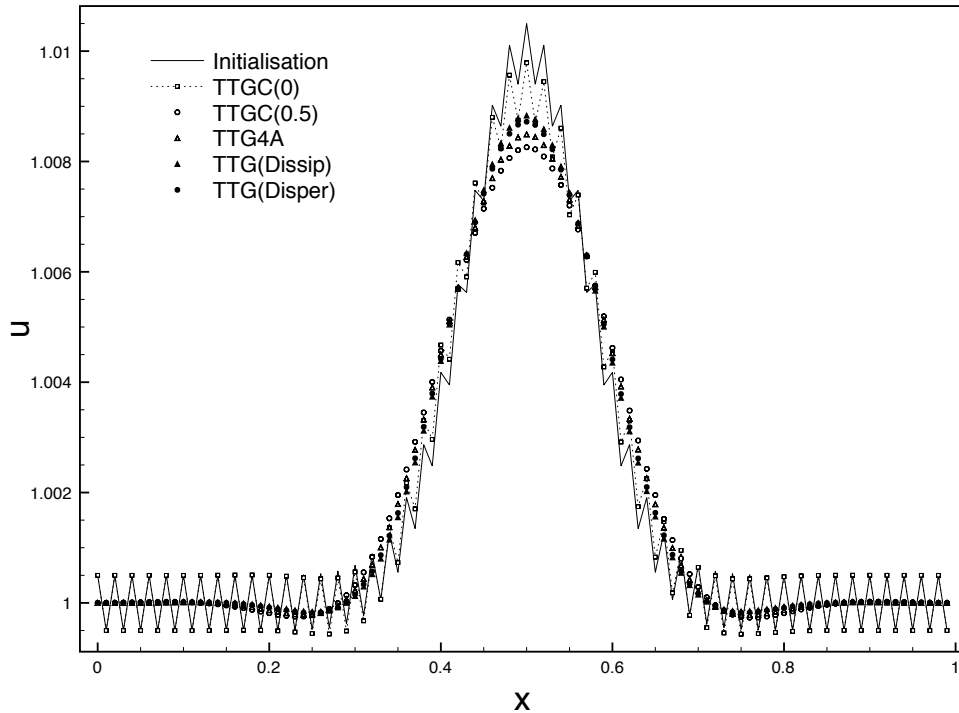


FIG. B.7 - Résultats obtenus après 120 tours de la pulsation gaussienne pour différents schémas numériques.

La figure B.8-a confirme les constatations précédentes. Il apparaît de façon encore plus évidente que le schéma $\text{TTGC}(\gamma = 0)$ n'est pas dissipatif au sens de Kreiss ($|G(\pi)| = 1$!). De la même manière, le schéma $\text{TTGC}(\gamma = 0.5)$ est très peu dissipatif au sens de Kreiss, ce qui paraît surprenant car il est globalement le schéma le plus dissipatif. Sur 120 tours, les wiggles ont disparu mais cette remarque

indique qu'ils ne disparaissent que très lentement. Ainsi, nous pouvons considérer que ces analyses font du schéma TTGC($\gamma = 0.5$) un candidat susceptible de devenir instable dans des cas non linéaires. Il est très intéressant de noter que les schémas optimums ont le comportement que nous souhaitons : ils sont moins dissipatifs que TTG4A et relativement proche de TTGC($\gamma = 0$) à basse fréquence (là où ce dernier est excellent). En outre, ils sont bien plus dissipatifs au sens de Kreiss, ce que nous souhaitons également.

Les deux schémas les plus dissipatifs (TTG4A et TTGC($\gamma = 0.5$)) sont en avance de phase ($c_R^*/c > 1$), ce qui n'est pas forcément un désavantage. Cependant, nous n'aborderons pas plus en détail ce sujet car il ne présente pas d'intérêt pour l'étude que nous menons, en tout cas pour le moment. En s'intéressant uniquement à la valeur absolue de la vitesse de phase modifiée, la figure B.8-b confirme la grande qualité des schémas TTG en terme de dispersion. Les schémas optimums sont, comme attendu, les meilleurs pour ce CFL de 0.55. Le schéma TTG(*Disper*) présente ici un résultat particulièrement impressionnant (au niveau d'un schéma de Padé d'ordre 6 !).

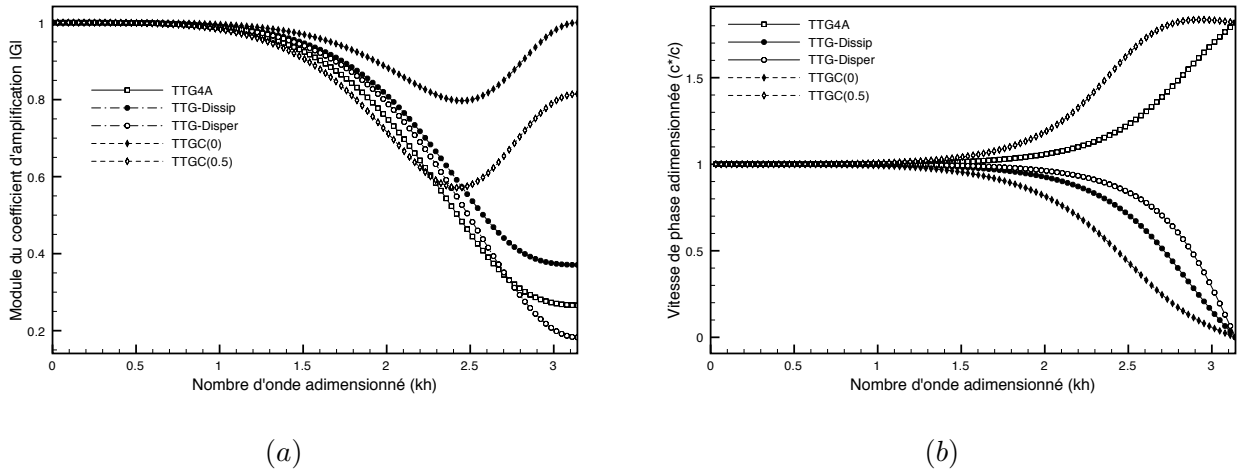


FIG. B.8 - Module $|G|$ et vitesse de phase $\frac{c_R^*}{c}$ modifiée des schéma TTG4A, TTGC($\gamma = 0.01$), TTG(*Dissip*) et TTG(*Disper*). Le CFL est de 0.55.

B.5 Conclusions et perspectives

Cette annexe représente un exercice intéressant dont le but est d'optimiser les coefficients ($\alpha, \beta, \theta_1, \theta_2, \epsilon_1, \epsilon_2$) de la famille des schémas TTG, afin d'obtenir les performances optimales en terme de dissipation et de dispersion. Les résultats obtenus par les schémas TTG(*Dissip*) et TTG(*Disper*) démontrent l'intérêt d'une telle étude. Les objectifs fixés ici ne sont qu'un exemple mais ils donnent déjà satisfaction.

Nous pouvons imaginer optimiser les schémas TTG de manières différentes.

- La préservation de la relation de dispersion peut être réalisée en minimisant la norme L^2 de l'erreur sur la partie réelle du nombre d'onde modifié sur un intervalle $[k_{min}, k_{max}]$, soit :

$$L^2(\epsilon_{k_R}^*) = \int_{k_{min}}^{k_{max}} |k - k_R^*(k)|^2 dk.$$

Il est aussi possible de réaliser la même chose pour la partie imaginaire du nombre d'onde modifié

pour diminuer la dissipation, tout en préservant la contrainte d'être suffisamment dissipatif au sens de Kreiss (pour assurer la stabilité dans le cas non-linéaire).

- L'erreur de troncature peut également être utilisée et nous pouvons choisir de minimiser les premiers termes de celle-ci.
- En multidimensionnel, d'autres propriétés peuvent être recherchées. Il est notamment envisageable de rechercher le domaine de stabilité le plus grand possible ou bien encore identifier un schéma le plus isotrope possible.

Il y a encore bien d'autres possibilités à tester. Le passage à un système d'équations (Euler) et à une étude multidimensionnelle reste à faire et à tester. Ces étapes pourront être faites rapidement dans la mesure où le codage de tels schémas, dont la structure est très similaire aux schémas TTG4A et TTG4B, dans AVBP est aisé.

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

Doctorat d'Université, spécialité *Dynamique des Fluides*

6 décembre 2007

Nicolas LAMARQUE

Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère.

Pour réduire la consommation en carburant et respecter des normes anti-pollution toujours plus sévères, les motoristes font de plus en plus appel à la combustion prémélangée pauvre. Cependant, ce régime est enclin aux instabilités thermo-acoustiques pouvant dégrader fortement le foyer. La Simulation aux Grandes Echelles (LES) est, à ce titre, un outil présentant un grand potentiel pour une meilleure compréhension de ces phénomènes, comme l'ont montré certains travaux réalisés jusqu'à présent. Dans la majorité des applications industrielles, le carburant est injecté sous forme liquide, ce qu'il faut prendre en compte dans les simulations numériques. Cette thèse présente donc une stratégie de description de la combustion diphasique turbulente en géométries complexes, basée sur le formalisme Eulérien mésoscopique pour la phase dispersée.

La discrétisation des termes convectifs constitue un des points cruciaux pour assurer la qualité d'une LES. Une description détaillée de différents schémas numériques de convection (volumes finis cell-vertex, Taylor-Galerkin) est tout d'abord fournie. On procède ensuite à une analyse théorique puis pratique des erreurs induites par ceux-ci et on propose des solutions pour les réduire. Une attention particulière est portée aux discrétisations aux bords du domaine de calcul ainsi qu'au type de conditions limites choisi. La chambre de combustion du banc expérimental MERCATO de l'ONERA sert à mettre en oeuvre, à valider et enfin à évaluer ces stratégies numériques.

Enfin, trois méthodes de détermination des impédances acoustiques de conduits à section variable sont analysées et validées. Celles-ci permettent de caractériser les conditions limites d'entrée et de sortie des brûleurs industriels, en particulier pour les calculs de modes propres acoustiques.

Mots clefs : Simulation aux Grandes Echelles, formalisme Euler-Euler, schémas numériques pour la convection, combustion diphasique turbulente, géométries complexes, conditions limites acoustiques.

Numerical schemes and boundary conditions for LES of two-phase combustion in helicopters burners

To reduce fuel consumption and pollutant emissions, burner designers are more and more using lean premixed combustion. Nevertheless, this regime suffers from thermo-acoustic instabilities sometimes leading to severe damages. Large Eddy Simulation (LES) is a promising tool to better understand and control those phenomena, as shown through previous researches. In the majority of industrial applications, fuel is injected as a liquid phase, which has to be taken into account in numerical simulations. This thesis describes a strategy based on Euler-Euler formalism to simulate two-phase turbulent reactive flows in complex geometries.

Discretisation of convective terms is a key issue to ensure the quality of a LES. A fine description of different convection numerical schemes (cell-vertex finite volume method, Taylor-Galerkin schemes) is first given. Then theoretical and practical error analyses are supplied and some possible improvements are proposed. Special attention is paid for the discretizations and boundary conditions at the computational domain borders. ONERA experimental burner is used to validate and evaluate the numerical methods aforementioned.

Eventually, three methodologies to determine section varying ducts acoustic impedances are presented and analysed. They provide inlet and outlet boundary conditions for industrial burners, especially for acoustic eigenmodes calculations.

Keywords : Large Eddy Simulation, Euler-Euler formalism, numerical schemes for convection, two-phase turbulent combustion, complex geometries, acoustic boundary conditions.

Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS)

42 avenue Gaspard Coriolis

31057 Toulouse Cedex 1 - France